



HAL
open science

Vers des simulations numériques prédictives des détonations gazeuses : influence de la cinétique chimique, de l'équation d'état et des effets tridimensionnels

Saïd Taïleb

► To cite this version:

Saïd Taïleb. Vers des simulations numériques prédictives des détonations gazeuses : influence de la cinétique chimique, de l'équation d'état et des effets tridimensionnels. Autre. ISAE-ENSMA Ecole Nationale Supérieure de Mécanique et d'Aérotechnique - Poitiers, 2020. Français. NNT : 2020ESMA0012 . tel-03079083

HAL Id: tel-03079083

<https://theses.hal.science/tel-03079083>

Submitted on 17 Dec 2020

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

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

THÈSE

POUR L'OBTENTION DU GRADE DE

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

(DIPLOME NATIONAL - ARRÊTÉ DU 25 MAI 2016)

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

SECTEUR DE RECHERCHE : ÉNERGÉTIQUE, THERMIQUE, COMBUSTION

PRÉSENTÉE PAR :

SAID TAILEB

VERS DES SIMULATIONS NUMÉRIQUES PRÉDICTIVES DES DÉTONATIONS GAZEUSES - INFLUENCE DE LA CINÉTIQUE CHIMIQUE, DE L'ÉQUATION D'ÉTAT ET DES EFFETS TRIDIMENSIONNELS

Directeur de thèse : **ASHWIN CHINNAYYA**

Co-encadrant : **JOSUÉ MELGUIZO-GAVILANES**

SOUTENUE LE 13 OCTOBRE 2020
DEVANT LA COMMISSION D'EXAMEN

JURY :

PRÉSIDENT

M. ERIC GONCALVES DA SILVA, PROFESSEUR DES UNIVERSITÉS, INSTITUT P' – ISAE-ENSMA

RAPPORTEURS

M. LUC BAUWENS, PROFESSEUR, UNIVERSITY OF CALGARY
M. RÉMY MÉVEL, ASSOCIATE PROFESSOR, TSINGHUA UNIVERSITY

MEMBRES

MME. PASCALE DOMINGO, DIRECTRICE DE RECHERCHE, CORIA, CNRS
M. ASHWIN CHINNAYYA, PROFESSEUR DES UNIVERSITÉS, INSTITUT P' – ISAE-ENSMA
M. JOSUÉ MELGUIZO-GAVILANES, CHARGÉ DE RECHERCHE, INSTITUT P', CNRS

À mes parents, Amar et Sadia

Remerciements

Je tiens à témoigner ma sincère gratitude à M. Ashwin Chinnayya de m'avoir accordé sa confiance et offert la possibilité d'accomplir cette thèse. Il a partagé avec moi pendant ces années, la passion et la rigueur nécessaire pour fournir un travail de qualité. J'adresse également un immense merci à M. Josué Melguizo-Gavilanes. Les idées et les conseils qu'il a apporté m'ont permis de me surpasser dans tous les aspects tant scientifiques que humains. Travailler avec ce tandem a été un immense honneur.

Je voudrais adresser mes remerciements aux membres du jury, M. Luc Bauwens, M. Rémy Mével, Mme. Pascale Domingo ainsi que Eric Goncalves Da Silva, le président du jury, pour avoir pris le temps de lire mon manuscrit. Les discussions et les remarques enrichissantes vont contribuer à l'évolution de la thématique de travail de notre équipe.

Une mention spéciale pour M. Maxime Reynaud pour m'avoir accompagné de prêt pendant mes débuts de thèse et aidé à appréhender les notions de base de la détonation et du calcul à haute performance. Malgré son emploi de temps chargé étant en dernière année, sa disponibilité et ses interventions furent décisives dans la suite de mes travaux. J'ai gagné ainsi un excellent collègue et un grand ami.

Je tiens à associer à ces remerciements les membres de l'équipe DÉTO : M. Hazem El-Rabii, Mme. Ratiba Zitoune, M. Pierre Vidal et les membres de l'équipe CT : M. Vincent Robin, M. Zakaria Bouali, M. Arnaud Mura, M. Julien Sotton, M. Marc Bellenoue et M. Djamel Karmed, avec qui j'ai eu des échanges réguliers et enrichissants tout au long de la thèse. En outre, je remercie l'équipe technique : Alain, Nicolas, Maxime, Christophe et Hervé. Merci à Marie-Cannelle et à Catherine pour leur efficacité de travail.

Tout au long de ce parcours, j'ai fait la connaissance de plusieurs personnes qui m'ont énormément apporté. D'abord, la première promotion de doctorants (puis docteurs) qui m'a accueilli dans une atmosphère chaleureuse et a facilité mon intégration : Paul, Geoffrey, Carlos, Stéphane, Florian, Anthony, Radouan, Aimad, André, Sylvain, Romain, Quentin et Hugo. Par la suite, la nouvelle promotion (bientôt docteurs) : Alexandre, Thomas, Nicolas, Yves, Luis et Marcos.

Merci à Cyprien et à Luc de m'avoir épaulé pendant toutes ces années. Votre présence était plus qu'indispensable. Je suis certain que vous allez avoir une carrière scientifique de renommée. Je vous souhaite la plus grande des réussites.

Je n'oublie pas de remercier Lahna et Louis pour leur disponibilité et amitié sans faille.

Je vous souhaite une vie pleine de bonheur.

Je voudrai remercier tous les collègues de foot : Damien, Igor, Ugo, Jérémie, Jeremy, Happy, Bruno, J-B, J-C, Tarik, Ayoub, Kamal, Ibrahim, Soulimane, Abdel, Amine et Yassine. Le binôme formé avec Younès était juste excellent.

Merci au grand Guy Joulin qui m'a accordé pendant plusieurs années des séances quotidiennes d'anecdotes lors de notre trajet de Poitiers vers l'ENSMA. J'ai ainsi appris beaucoup de choses sur la combustion, la recherche et tous les domaines. Merci aussi pour les précieux livres.

Faire une thèse, c'est aussi voyager et assister à des conférences. J'ai ainsi rencontré et discuté avec plusieurs chercheurs dans ma discipline. Je tiens alors à remercier : M. XiaoCheng Mi, M. Matei Radulescu, M. Aliou Sow, M. Hiroaki Watanabe et mon grand ami M. Wilstrong Rakotoarison avec qui j'ai aussi partagé les bancs de la fac à l'UPMC.

Je remercie aussi mes amis d'enfance Nacim et Hamza avec qui j'ai fait mes premiers projets d'avenir. Ma gratitude va à ma famille dans son ensemble pour m'avoir donné les outils nécessaires pour avancer dans la vie. Je n'oublie pas aussi de mentionner mon village "Tigrourine" et ses habitants qui ont fourni un environnement adéquat à mon épanouissement.

Mes derniers remerciements et non les moindres, s'adressent à ma chère femme Henia qui m'a soutenu d'une façon indéfectible, au quotidien et pendant toutes ces années. Merci pour tout le bonheur inestimable que tu m'apportes. Tu as été la clé de voûte de tout ce projet.

Table des matières

Introduction	1
1 Généralités sur les détonations gazeuses	5
1.1 Modèle de Chapman-Jouguet	6
1.2 Modèle de Zel'dovich, Von Neuman et Döring	9
1.3 Dynamique du front de détonation	13
1.4 Structure cellulaire d'une détonation	18
1.5 Épaisseur hydrodynamique	23
1.6 Amorçage des détonations	24
1.7 Influence des conditions aux limites	25
1.8 Synthèse partielle	31
2 Équations mathématiques	33
2.1 Équations de conservation	33
2.2 Thermodynamique	34
2.3 Réactions et cinétique chimique	39
2.4 Synthèse partielle	46
3 Méthodes numériques	47
3.1 Introduction	48
3.2 Méthodes numériques	48
3.3 Outils de visualisation numérique et de post-traitement	67
3.4 Parallélisation et I/O du code	70
3.5 Cas-Tests de validation	73
3.6 Synthèse partielle	84
4 Influence de l'équation d'état sur la structure cellulaire	87
4.1 Introduction	87
4.2 Considérations théoriques	91
4.3 Propriétés du mélange	95

4.4	Solution stationnaire ZND	96
4.5	Détonation 2-D	96
4.6	Structure cellulaire	99
4.7	Origine de l'instabilité	101
4.8	Synthèse partielle	108
5	Influence de la cinétique chimique	111
5.1	Introduction	111
5.2	Description de la configuration	114
5.3	Topologie de la détonation idéale	117
5.4	Topologie de la détonation non-idéale	121
5.5	Comparaison des profils ZND	132
5.6	Synthèse partielle	134
6	Simulation des détonations multidimensionnelles	139
6.1	Introduction	139
6.2	Description de la configuration	141
6.3	Topologie de la détonation idéale	145
6.4	Profils moyens des détonations idéales	160
6.5	Topologie de la détonation non-idéale	184
6.6	Analyse des champs moyens des détonation non-idéales	192
6.7	Synthèse partielle	195
	Conclusions et perspectives	199
A	Maillage curviligne spécifique	207
A.1	Bilan sur les équations de conservation	207
A.2	Initialisation du maillage curviligne	211
B	Algorithmes de post-traitement	215
C	Relations CJ et vN pour l'équation d'état Noble-Abel	217
C.1	État von Nemann	217
C.2	Théorie CJ	220

C.3 Couplage entre le solveur aérodynamique et la chimie	224
D Étude de convergence en maillage	225
E Simulations complémentaires	229
F Liste de publications	231

Table des figures

1.1	Représentation d'une onde détonation selon du modèle CJ. La propagation est ici représentée dans le repère lié à la discontinuité réactive. Le milieu initial est au repos.	6
1.2	Représentation dans le diagramme $(p, 1/\rho)$ des positions de la droite de Rayleigh-Michelson (\mathcal{RM}) par rapport à l'adiabatique de Crussard (\mathcal{C}) selon la célérité D de l'onde de détonation. Les indices 0 et CJ correspondent à l'état initial et de Chapman-Jouguet, respectivement.	8
1.3	Structure interne de l'onde de détonation selon la description du modèle ZND.	10
1.4	Représentation schématique de l'évolution des variables thermodynamiques dans le diagramme $(p, 1/\rho)$ telle que décrite par le modèle ZND.	11
1.5	Solution de l'équation 1.20 dans le diagramme de phases $(u^2 - Y_f)$, adapté des travaux de Clavin et Searby [14].	13
1.6	Évolution temporelle de la pression post-choc pour les différentes énergies d'activation : $E_a^* = 24$ (a), $E_a^* = 25.24$ (b), $E_a^* = 25.28$ (c), $E_a^* = 27$ (d), $E_a^* = 27.40$ (e), $E_a^* = 27.8$ (f) [30]. La pression est normalisée par p_{vN}	15
1.7	Diagramme de bifurcation des maxima d'oscillations de vitesse du front de détonation en fonction de l'énergie d'activation réduite E_a^* [31].	16
1.8	gauche : courbe de limite de stabilité obtenue avec une chimie à deux étapes ; droite : Caractérisation des effets de la dilution de l'acétylène C_2H_2 à la stoechiométrie par de l'argon Ar en utilisant le facteur χ [40]	18
1.9	Gauche : strioscopie de la structure interne du front de détonation pour un mélange de $CH_4 + 2 O_2$ à $p_0 = 3.4$ kPa ; Droite : Schéma explicatif des différentes composantes du front [47].	19
1.10	Gauche : Exemple d'impression sur plaque de suie de la trajectoire des points triples lors de la propagation de la détonation [52] ; Droite : schéma représentant la trajectoire des points triples, les cellules ayant une taille λ et une longueur L	20
1.11	Classification des structures cellulaires suivant leur régularité tel que proposé par Libouton et al. [59].	21
1.12	Photographie de l'empreinte du front de détonation. Gauche : section circulaire de diamètre de 52 mm, mélange $C_2H_2 + 2.5 O_2 + 10.5 Ar$, à pression 20 kPa [64] ; Droite : section rectangulaire 47.5×22 mm ² , mélange $C_2H_4 + 3 O_2 + 10 Ar$, à pression 20 kPa [58].	22
1.13	Simulation numérique d'une chambre à combustion d'un moteur à détonation rotative. Le front de détonation A se propage dans un milieu E confiné d'un côté par le fond de la chambre et de l'autre par des gaz brûlés C . Figure adaptée de Sousa et al. [115].	28

1.14	Gauche : schéma représentant la structure de propagation de la détonation dans un milieu semi-confiné par un gaz inerte, adapté de [117]. Droite : représentation strioscopique de la propagation de la détonation dans un mélange $H_2 - O_2$ à la stœchiométrie confiné par N_2 [118].	29
1.15	Visualisation du front de structure de la détonation pour un mélange 50% $H_2 + 50\% O_2$ confiné par He (gauche) et H_2 (droite). Adapté de Adams et al. [120].	30
3.1	Schéma de l'approximation choc-choc du solveur HLLC au point $i + 1/2$, dans un diagramme (x, t) [165].	52
3.2	Description de la solution du problème de Riemann pour le solveur HLLC. Gauche : états-étoile HLLC, version originale. Droite : version HLLCM [166].	55
3.3	Illustration du processus de recyclage.	63
3.4	Illustration du raffinement statique de la résolution numérique.	63
3.5	Nouvelles coordonnées dans lequel pour le passage de maillage cartésien en curviligne adapté à un front de détonation courbe.	65
3.6	Organigramme de fonctionnement du solveur RESIDENT	68
3.7	Étude de scalabilité à travers le <i>speed-up</i> (a) et l'efficacité (b) en fonction du nombre de processus. Processus de référence pour $n = 32$	71
3.8	Étude des performances d'écriture de fichier à travers. (a) : Temps nécessaire pour écrire 10 fichiers de taille de 680 en fonction du nombre de processus ; (b) : temps nécessaire à écrire 10 fichiers avec 400 processus en fonction de la taille des fichiers	72
3.9	Schéma représentant le tube à choc. Haut : état initial. Bas : schéma représentant la propagation des ondes. Les différents états issus de ce problème de Riemann sont numérotés de 1 à 4	74
3.10	Comparaison des profils de masse volumique, pression, température et vitesse matérielle. Le temps final est de 0.5. Seul un point sur quatre est représenté	74
3.11	Comparaison de l'erreur sur la masse volumique pour les différents schémas numériques par rapport à la solution exacte du tube à choc.	75
3.12	Profils de masse volumique, de vitesse, de température et du coefficient polytropique pour le tube à choc multi-espèces.	76
3.13	Schéma représentatif des conditions initiales pour l'étude du problème de Riemann 2-D.	76
3.14	Champs de Mach et 20 iso-contours de densité pour 6 tests du problème de Riemann 2-D.	78
3.15	Représentation du maillage, (a) curviligne (b) rectiligne et des conditions initiales du test de Sod dans les deux maillages. La résolution est ici de 50 mailles suivant chaque direction	80
3.16	Évolution de la vitesse, densité et température dans le tube à choc pour 4 résolutions de maillages : 125, 250, 500 et 1000 mailles dans la direction longitudinale.	80

3.17	Profils de vitesse horizontale, de densité, de température et de vitesse transverse pour le cas-test du tube à choc. Comparaison des résultats numériques avec la solution exacte.	81
3.18	Visualisation du front de détonation issu des simulations 2D : (a) Schlieren numérique de masse volumique, (b) pression, (c) fraction massique des gaz frais, (d) température, (e) Mach dans le repère lié à la détonation, (f) vorticit�.	83
3.19	Structure cellulaire de la d�toantion	84
4.1	Sch�ma illustratif des r�gimes de d�tonation � travers la pression des produits de d�tonation en fonction de la masse volumique initiale. Adapt� de Schmidt et Butler [208].	88
4.2	Comparaison entre des mesures exp�rimentales et des calculs th�oriques de l'�tat CJ avec plusieurs �quations d'�tat en fonction de la pression initiale � la temp�rature $T_0 = 300$ K. (a) : Vitesse de d�tonation pour un m�lange $2\text{H}_2 - \text{O}_2$; (b) : Vitesse de d�tonation pour un m�lange $\text{C}_3\text{H}_8 - 4.3\text{O}_2 - 8.7\text{N}_2$; (c) : Pression � l'�tat CJ pour un m�lange $\text{H}_2 - \text{O}_2$; (d) : Temp�rature CJ pour un m�lange $\text{H}_2 - \text{O}_2$. Points exp�rimentaux tir�s de Bauer [218].	89
4.3	Variations de ρ/ρ_0 , p/p_0 , T/T_0 , et u/u_0 � travers un choc en fonction du nombre de mach M_0 amont, pour $\gamma = 1.4$ et diff�rentes valeurs de $b\rho_0$	94
4.4	Comparaison des profils ZND pour GP et NA. Masse volumique, pression, temp�rature et Mach. Le co-volume, $b = 9.38 \times 10^{-4}$ m ³ /kg est ajust� pour obtenir la vitesse de d�tonation exp�rimentale D_{CJ} pour un m�lange r�actif $\text{H}_2 - \text{O}_2$ � la st�ochiom�trie [208].	97
4.5	(a) : Vitesse de d�tonation en fonction de la distance parcourue normalis�e par $l_{1/2}$. (b) : Fonction de densit� de probabilit� (pdf) de la vitesse. Comparaison entre les deux �quations d'�tat GP et NA. Les vitesses sont normalis�es par D_{CJ}	98
4.6	�volution du profil moyen de masse volumique (a), de pression (b), de temp�rature et du nombre de Mach dans le rep�re du choc (d) en fonction de la distance au choc normalis�e par la demi-longueur de r�action $l_{1/2}$ (symboles). Comparaison avec les r�sultats du mod�le ZND (lignes).	100
4.7	Historique des maxima de pression illustrant la structure cellulaire de d�tonation pour les deux �quations d'�tat (a) : Noble-Abel (b) : Gaz parfait. Les distances sont normalis�es avec la demi-longueur de r�action $l_{1/2}$. La pression initiale est de $p_0 = 50$ bar.	101
4.8	Agrandissement de la structure cellulaire de d�tonation dans la portion $x/l_{1/2} \in [200, 360]$; $y/l_{1/2} \in [80, 140]$ pour les deux �quations d'�tat (a) : Noble-Abel (b) : Gaz parfait. Les distances sont normalis�es avec la demi-longueur de r�action $l_{1/2}$. Les conditions initiales sont : $p_0 = 50$ bar, $T_0 = 300$ K.	102
4.9	S�quence d'images des champs de temp�rature normalis�e (a), Schlieren de masse volumique (b) et de pression (c) obtenus pour une d�tonation marginale. Comparaison entre les simulations Noble-Abel (haut) et Gaz parfait (bas).	104

4.10	Profils de masse volumique, de pression, de température et du nombre de Mach pour trois pression initiales $p_0 = 5$ MPa, 7.5 MPa et 10 MPa. Les distances sont normalisées par la demi-longueur de réaction $l_{1/2}$ de chaque cas.	106
4.11	Structure cellulaire de détonation pour deux EOS (a) : Noble-Abel (b) : Gaz parfait. La pression initiale est de $p_0 = 7.5$ MPa, le coefficient isentropique étant de $\chi_{s,7.5} = 1.7$	107
4.12	Structure cellulaire de détonation pour deux EOS (a) : Noble-Abel (b) : Gaz parfait. La pression initiale est de $p_0 = 10$ MPa, le coefficient isentropique étant de de $\chi^{s,10} = 1.93$	107
5.1	Résumé des déficits de vitesses rapportés par des simulations numériques et des expériences sur les moteurs à détonation rotative. Adapté de la thèse de Andrus [236], les données sont collectées des travaux [237-248].	112
5.2	(a) : Temps d'induction calculé à partir d'une combustion à volume constant, en fonction de l'inverse de la température. La masse volumique est fixée à ρ_{vN} . (b) : Erreur relative des mécanismes simplifiés par rapport au mécanisme détaillé de Mével [252].	115
5.3	Schéma représentatif de la stratégie suivie dans les simulations.	116
5.4	Vitesse instantanée normalisée du front de choc en fonction de la distance (en haut). Fonction de densité de probabilité de la vitesse du choc principal (en bas) pour une chimie) une étape, une chimie à trois étapes et une chimie détaillée – détonation idéale. La détonation s'est propagée environ 100 μ s.	118
5.5	Gauche : Champs de température normalisée. Droite : Schlieren de densité. Comparaison entre les mécanismes : Haut : une étape, milieu : trois étapes, bas : chimie détaillée.	120
5.6	Gauche : Historique des maxima de pression illustrant la structure cellulaire de la détonation. Droite : Histogramme montrant la distribution des tailles de cellules λ pour les trois modèles de cinétique retenues. Haut : chimie à une étape. Centre : Chimie à trois étapes. Bas : Chimie détaillée. L'épaisseur du canal est de $h = 20$ mm.	122
5.7	Structure instantanée du front de détonation pour la chimie à une étape (en haut), la chimie à trois étapes (au centre) et la chimie détaillée (en bas) après 20 μ s de propagation dans la configuration semi-confinée. La hauteur de la couche réactive est de $h = 20$ mm. La ligne horizontale en trait plein montre l'emplacement de l'interface réactif/inerte.	124
5.8	Structure instantanée du front de détonation pour la chimie à une étape (en haut), la chimie à trois étapes (au centre) et la chimie détaillée (en bas) après 100 μ s de propagation dans la configuration semi-confinée. La hauteur de la couche réactive est de $h = 20$ mm. La ligne horizontale en trait plein montre l'emplacement de l'interface réactif/inerte.	125
5.9	Comparaison des champs de Schlieren numérique entre les trois modèles cinétiques pour une hauteur réactive légèrement supérieure à la hauteur critique h_{crit} correspondante. Gauche : chimie à une étape ($h = 28$ mm). Centre : chimie à trois étapes ($h = 24$ mm). Droite : chimie détaillée ($h = 10$ mm))	126

5.10	Structure cellulaire du modèle à une seule étape pour deux hauteurs de couches réactives : $h = 28$ mm - (Haut) ; $h_{\text{crit}} = 24$ mm (Bas).	127
5.11	Structure cellulaire du modèle à trois étape pour deux hauteurs : $h = 24$ mm (haut) ; $h_{\text{crit}} = 20$ mm (bas).	128
5.12	structure cellulaire pour la chimie détaillée pour deux hauteurs de couches réactives : $h = 10$ mm (haut) ; $h_{\text{crit}} = 6$ mm (bas). Notez que les échelles horizontale et verticale sont différentes pour faciliter la visualisation de la structure cellulaire.	129
5.13	En haut : Schlieren numérique de l'écoulement. En bas : agrandissement sur une poche de gaz imbrûlés, située proche de l'interface.	130
5.14	Délais d'induction à volume constant, τ_{ind} , calculés à différents endroits à l'intérieur de la poche de gaz imbrûlés.	131
5.15	Structure ZND en utilisant une chimie à une étape, une chimie à trois étapes et une chimie détaillée. La pression, la densité et la température sont normalisées par leurs valeurs dans le mélange frais, la distance par $l_{\text{ind, Detailed}} = 35 \mu\text{m}$. La thermicité $\dot{\sigma}$ est conservée sous sa forme dimensionnelle.	133
6.1	Observation expérimentale et numérique d'un front de détonation dans un tube à section rectangulaire. Gauche : Adapté de Desbordes et al. [58]. Droite : Simulation à titre illustratif réalisée avec RESIDENT.	140
6.2	Profils de température (gauche) et de fraction massique (droite) du modèle ZND pour les différentes énergies d'activation.	142
6.3	Gauche : vitesse instantanée de la détonation en fonction de la distance normalisée par la demi-longueur de réaction $l_{1/2}$. Droite : représentation des énergies d'activation réduites dans le lieu de stabilité. La limite de stabilité est représentée par des traits en pointillés. Le pourcentage présente le degré de dilution à l'Argon du mélange $\text{H}_2 - \text{O}_2$	144
6.4	Structure cellulaire de la détonation pour les différentes énergies d'activation réduites.	146
6.5	Représentation schématique des conditions initiales 3D pour les deux modes de détonation pour les configurations 3-D : (a) : mode diagonal, (b) : mode rectangulaire	147
6.6	Comparaison des champs de température adimensionnée T/T_0 pour deux énergies d'activation réduites. La séquence représente 4/5 d'une cellule.	148
6.7	Comparaison des champs de vorticit� normalis�e, avec des contours de gradient de pression pour deux �nergies d'activation. La s�quence pr�sente 4/5 d'une cellule.	149
6.8	�volution des termes de transport de vorticit�. Une moyenne selon la direction y des valeurs absolues est r�alis�e. Les quatre �nergies d'activation sont pr�sent�es par (a) $E_a/R_uT_0 = 20$, (b) $E_a/R_uT_0 = 30$, (c) $E_a/R_uT_0 = 38.23$, (d) $E_a/R_uT_0 = 48$	150

6.9	Contour du front de détonation (a) et de la structure cellulaire engendrée par la propagation des lignes de points triples (b). L'énergie d'activation réduite de la simulation est $E_a/R_uT_0 = 20$. La simulation est amorcée par un mode rectangulaire.	152
6.10	Contour du front de détonation (a) et structure cellulaire engendrée par la propagation des lignes de points triples (b). L'énergie d'activation réduite de la simulation est $E_a/R_uT_0 = 20$. La simulation est amorcée par un mode diagonal.	153
6.11	Comparaison de la structure cellulaire entre la simulation (droite) et les expériences réalisées par Hanana et al. [266] (gauche). Les cas : (Ra), (Rab), (Rb) et (D) correspondent respectivement aux modes : en phase, partiellement déphasé, en opposition de phase et diagonal.	155
6.12	Contour du front de détonation (a) et de la structure cellulaire engendrée par la propagation des lignes de points triples (b) pour une énergie d'activation réduite $E_a/R_uT_0 = 48$ pour chaque initialisation. La simulation est amorcée par un mode rectangulaire.	156
6.13	Contour du front de détonation (a) et de la structure cellulaire engendrée par la propagation des lignes de points triples (b) pour une énergie d'activation réduite $E_a/R_uT_0 = 48$ pour chaque initialisation. La simulation est amorcée par un mode diagonal.	157
6.14	Visualisation du front de détonation et de la structure tourbillonnaire engendrée pour les énergies d'activation $E_a/R_uT_0 = 20, 30, 38.23, 40$. Iso-surface du critère Q avec $Q_{\text{iso}} = 7 \times 10^{-3}Q_{\text{max}}$ coloré par la température.	159
6.15	Évolution de la norme des termes de transport de vorticit�� 3-D. Une moyenne dans le plan (x, y) des valeurs absolues est r��alis��e. Les quatre ��nergies d'activation sont pr��sent��es : (a) $E_a/R_uT_0 = 20$, (b) $E_a/R_uT_0 = 30$, (c) $E_a/R_uT_0 = 38.23$, (d) $E_a/R_uT_0 = 48$	161
6.16	Position instantan��e (bleu) et moyenne (rouge) du front de d��tonation bidimensionnel pour les diff��rentes valeurs d'��nergie d'activation r��duite, pour une simulation 2-D. (a) : $E_a/R_uT_0 = 20$, (b) : $E_a/R_uT_0 = 30$, (c) : $E_a/R_uT_0 = 38.23$ et (d) : $E_a/R_uT_0 = 48$	162
6.17	��volution des profils moyens de pression \bar{p} normalis��e par p_0 en aval du front de d��tonation. (a) $E_a/R_uT_0 = 20$, (b) $E_a/R_uT_0 = 30$, (c) $E_a/R_uT_0 = 38.23$ et (d) $E_a/R_uT_0 = 48$	163
6.18	��volution des profils moyens de la temp��rature \tilde{T} normalis��e par T_0 en aval du front de d��tonation. (a) $E_a/R_uT_0 = 20$, (b) $E_a/R_uT_0 = 30$, (c) $E_a/R_uT_0 = 38.23$ et (d) $E_a/R_uT_0 = 48$	164
6.19	��volution des profils moyens du nombre de Mach \tilde{M} en aval du front de d��tonation. (a) $E_a/R_uT_0 = 20$, (b) $E_a/R_uT_0 = 30$, (c) $E_a/R_uT_0 = 38.23$ et (d) $E_a/R_uT_0 = 48$	165
6.20	��volution des profils moyens de la fraction massique de gaz frais \tilde{Y} en aval du front de d��tonation. (a) $E_a/R_uT_0 = 20$, (b) $E_a/R_uT_0 = 30$, (c) $E_a/R_uT_0 = 38.23$ et (d) $E_a/R_uT_0 = 48$	166

6.21	Taux de production moyen d'énergie chimique $\tilde{\omega}$ pour les différents mélange. (a) La distance normalisée par la demi-longueur de réaction $l_{1/2}$, (b) la distance est normalisée par le rapport demi-longueur de réaction $l_{1/2}$ sur l'énergie d'activation réduite $(E_a/R_u T_0)^\alpha$, avec $\alpha = 0.46$	166
6.22	Profils moyens des variables thermodynamiques obtenus en fonction de la fraction massique des gaz frais pour les différentes énergies d'activation. . .	167
6.23	Profils moyens des variables thermodynamiques et de la fraction massique des gaz frais obtenus pour différents normalisation spatiales. (Haut) normalisation de la distance par la demi-longueur de réaction, (bas) : distance normalisée par l'épaisseur hydrodynamique.	168
6.24	Champs de fluctuations de masse volumique normalisées par la masse volumique moyenne, présenté dans le repère moyen du choc. (a) $E_a/R_u T_0 = 20$, (b) $E_a/R_u T_0 = 30$, (c) $E_a/R_u T_0 = 38.23$ et (d) $E_a/R_u T_0 = 48$	170
6.25	Évolution du nombre de Mach turbulent en fonction de la distance pour différentes énergies d'activation pour les cas 2-D et 3-D. (a) $E_a/R_u T_0 = 20$, (b) $E_a/R_u T_0 = 30$, (c) $E_a/R_u T_0 = 38.23$ et (d) $E_a/R_u T_0 = 48$	170
6.26	Évolution des fluctuations thermodynamiques normalisés en fonction de la distance pour différentes énergies d'activation pour le cas 3-D. (a) $E_a/R_u T_0 = 20$, (b) $E_a/R_u T_0 = 30$, (c) $E_a/R_u T_0 = 38.23$ et (d) $E_a/R_u T_0 = 48$	171
6.27	Évolution des coefficients polytropiques reliant les moyennes des fluctuations thermodynamiques normalisés en fonction de la distance derrière le choc pour les quatre énergies d'activation pour le cas 3-D. (a) $E_a/R_u T_0 = 20$, (b) $E_a/R_u T_0 = 30$, (c) $E_a/R_u T_0 = 38.23$ et (d) $E_a/R_u T_0 = 48$	173
6.28	Évolution des coefficients de corrélation entre des variables de fluctuations thermodynamiques pour les différents mélanges dans la configuration 3-D. (a) $:\overline{p' \rho'} / \sqrt{\overline{p'^2} \overline{\rho'^2}}$, (b) $:\overline{T'' p'} / \sqrt{\overline{T''^2} \overline{p'^2}}$, (c) $:\overline{T'' \rho'} / \sqrt{\overline{T''^2} \overline{\rho'^2}}$	174
6.29	Fluctuations de température normalisées en fonction de fluctuations de fraction massique pour les différentes énergies d'activation.	175
6.30	Variation longitudinale des contraintes normales du tenseur de Reynolds normalisées par D_{CJ}^2 . (a) $E_a/R_u T_0 = 20$, (b) $E_a/R_u T_0 = 30$, (a) $E_a/R_u T_0 = 38.23$ et (a) $E_a/R_u T_0 = 48$	176
6.31	Évolution longitudinale de (a) l'énergie cinétique des fluctuations et de (b) le rapport de deux composantes diagonales du tenseur de Reynolds.	176
6.32	Plan des invariants du tenseur d'anisotropie pour les différents mélanges. (a) $E_a/R_u T_0 = 20$, (b) $E_a/R_u T_0 = 30$, (a) $E_a/R_u T_0 = 38.23$ et (a) $E_a/R_u T_0 = 48$	178
6.33	Évolution des coefficients de corrélation entre des variables de fluctuations des vitesses pour les différents mélanges dans la configuration 3-D.	178
6.34	(a) : Profils de l'énergie totale de Chu, (b) : profils de l'énergie totale de Chu divisée par la chaleur de réaction Q et l'énergie d'activation réduite $E_a/R_u T_0$. Les distances normalisée la demi-longueur de réaction $l_{1/2}$	180
6.35	Profils des contribution $\tau_S, \tau_T, \tau_\rho, \tau_p$, pour les différentes énergie d'activation. (a) $:\overline{E_a/R_u T_0} = 20$, (b) $E_a/R_u T_0 = 30$, (c) $:\overline{E_a/R_u T_0} = 38.23$ et (d) $:\overline{E_a/R_u T_0} = 48$	181

6.36	Évolution des trois contributions d'énergie des fluctuations de Chu [290] normalisées par $\rho_0 D_{CJ}^2$ pour les quatre mélanges étudiés. (a) : $E_a/R_u T_0 = 20$, (b) $E_a/R_u T_0 = 30$, (c) : $E_a/R_u T_0 = 38.23$ et (d) : $E_a/R_u T_0 = 48$	181
6.37	Évolution des rapports des différentes énergies des fluctuations en fonction de la distance pour différentes énergies d'activation. (a) $E_a/R_u T_0 = 20$, (b) $E_a/R_u T_0 = 30$, (c) $E_a/R_u T_0 = 38.23$ et (d) $E_a/R_u T_0 = 48$	183
6.38	Évolution de la micro-échelle de Taylor λ_i ($i = x, y, z$ pour chaque direction d'espace) normalisée par la demi-longueur de réaction pour différent mélanges, en aval du choc. (a) : $E_a/R_u T_0 = 20$, (b) : $E_a/R_u T_0 = 30$, (a) : $E_a/R_u T_0 = 38.23$ et (a) : $E_a/R_u T_0 = 48$	184
6.39	Schéma représentatif de la stratégie suivie dans les simulations.	185
6.40	Visualisation de la détonation 2-D dans un milieu confiné par un gaz inerte. Le mélange considéré correspond à $E_a/R_u T_0 = 20$. La hauteur réactive est de $h_r = 8 \text{ mm} = 88 l_{1/2} \approx 4.5 \lambda$	187
6.41	Visualisation de la détonation 2-D dans un milieu confiné par un gaz inerte. Le mélange considéré correspond à $E_a/R_u T_0 = 30$. La hauteur réactive est de $h_r = 14 \text{ mm} = 154 l_{1/2} \approx 7 \lambda$	188
6.42	Historique des maximums de pression illustrant la structure cellulaire de la détonation. Les distances sont normalisées par la demi-longueur de réaction. Les mélanges présentés sont (a) : $E_a/R_u T_0 = 20$, (b) : $E_a/R_u T_0 = 30$, (c) : $E_a/R_u T_0 = 38.23$ et (d) : $E_a/R_u T_0 = 48$ avec une organisation dans le sens des aiguilles d'une montre.	189
6.43	Limites de propagations à travers la hauteur de la couche réactive normalisée par la taille moyenne de cellule pour chaque énergie d'activation.	189
6.44	Visualisation du front de détonation et de la structure tourbillonnaire engendré pour l'énergie d'activation $E_a/R_u T_0 = 30$. Iso-surface du critère Q avec $Q_{\text{iso}} = 7 \times 10^{-3} Q_{\text{max}}$ coloré par la température.	190
6.45	Agrandissement sur la couche de mélange qui sépare les gaz brûlés du gaz inerte. Iso-surface du critère Q avec $Q_{\text{iso}} = 7 \times 10^{-3} Q_{\text{max}}$ coloré par la température.	191
6.46	Champs moyens de la température normalisée T/T_{inerte} de la détonation confinée par un gaz inerte. Le plan sonique est représenté en ligne noire, les lignes de courant en blanc et la zone de réaction en rouge.	193
6.47	Vitesse moyenne de la détonation en fonction de la courbure moyenne du front à $y = 0$ pour un mélange $E_a/R_u T_0 = 30$. (a) Normalisation par la demi-longueur de réaction, (b) normalisation par l'épaisseur hydrodynamique. Comparaison 2-D \square et 3-D \diamond pour un confinement à $T_{\text{inert}} = 124 \text{ K}$ et des confinement à différentes températures : $T_{\text{inerte}} = 295 \text{ K}$ \circ , $T_{\text{inerte}} = 750 \text{ K}$ \triangle et $T_{\text{inerte}} = 1400 \text{ K}$ \triangleleft	193
6.48	Vitesse moyenne de la détonation en fonction de la courbure moyenne du front à $y = 0$ pour un mélange $E_a/R_u T_0 = 30$. (a) Normalisation de la courbure par la demi-longueur de réaction, (b) normalisation de la courbure par l'épaisseur hydrodynamique. Comparaison 2-D \square et 3-D \diamond pour un confinement à $T_{\text{inert}} = 124 \text{ K}$ et des confinement à différentes températures : $T_{\text{inerte}} = 295 \text{ K}$ \circ , $T_{\text{inerte}} = 750 \text{ K}$ \triangle et $T_{\text{inerte}} = 1400 \text{ K}$ \triangleleft	194

6.49	Vitesse moyenne de la détonation en fonction de la courbure moyenne du front à $y = 0$ pour un mélange $E_a/R_u T_0 = 30$. (a) Normalisation de la courbure par la demi-longueur de réaction, (b) normalisation de la courbure par l'épaisseur hydrodynamique. Comparaison 2-D \square et 3-D \diamond pour un confinement à $T_{\text{inert}} = 124$ K	195
A.1	Nouvelles coordonnées dans lequel pour le passage de maillage cartésien en curviligne adapté à un front de détonation courbe.	207
A.2	Schéma représentant une initialisation du domaine avec un angle θ variable en fonction de la hauteur suivant y	212
C.1	Représentation schématique d'un choc droit.	218
D.1	Numerical soot foils for detailed chemistry as a function of increasing resolution ($\Delta x = l_{\text{ind}}/k$, $k = 2, 5, 10$ and 20). Distances are in mm.	227
D.2	Numerical soot foils for three-step chain-branching chemistry as a function of increasing resolution ($\Delta x = l_{\text{ind}}/k$, $k = 2, 5, 10$ and 20). Distances are in mm.	228
E.1	Visualisation de la détonation dans un milieu confiné par un gaz inerte. Le mélange considéré correspond à $E_a/R_u T_0 = 38.23$. La hauteur réactive est de $h_r = 28$ mm = $308 l_{1/2} \approx 14 \lambda$	229
E.2	Visualisation de la détonation dans un milieu confiné par un gaz inerte. Le mélange considéré correspond à $E_a/R_u T_0 = 38$. La hauteur réactive est de $h_r = 42$ mm = $462 l_{1/2} \approx 21 \lambda$	230
F.1	Combustion and Flame (2020) : https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2020.04.018	231
F.2	Shock Waves (2020) : https://doi.org/10.1007/s00193-020-00964-x	233
F.3	Aerotecnica Missili & Spazio (2018) : https://doi.org/10.1007/BF03405804	235

Liste des tableaux

3.1	Différences entre les grandeurs physiques pour le solveur de Riemann HLLC et HLLCM	56
3.2	États initiaux dans les quadrants 1-4 des problèmes de Riemann 2-D	77
3.3	Récapitulatif des conditions initiales utilisés dans le test de Sod	79
3.4	Résumé des variation de la vitesse transverse v en fonction de la résolution du maillage	81
4.1	Synthèse des propriétés à l'état CJ et vN	96
4.2	Propension de la réflexion d'un point triple à développer une bifurcation, pour un angle de 34° . Adapté de Mach et Radulescu [226] et Lau-Chapdelaine [234].	105
5.1	Hauteurs critiques h_{crit} et distances à l'extinction x_Q obtenues pour les différents modèles.	129
6.1	Paramètres CJ et vN	142
6.2	Facteurs préexponentiel et indice de sensibilité du mélange.	143
6.3	Taille de cellule mesurée pour chaque mélange.	145
6.4	Épaisseur hydrodynamique h_t	164
6.5	Dimensions des simulations 2-D semi-confinées.	186
6.6	Dimensions des simulations 3-D semi-confinées.	186
B.1	Algorithme de calcul de la position moyenne du choc (x_s)	215
B.2	Algorithme de calcul des moyennes conditionnées par la position du choc	216

Nomenclature

Acronymes

C	Crussard
H	Hugoniot
RM	Rayleigh-Michelson
CFL	Courant–Friedrichs–Lewy
CJ	Chapman-Jouguet
DDT	<i>Deflagration to Detonation Transition</i>
F	Représentation symbolique du combustible
ICs	<i>Initial Conditions</i>
MP	<i>Monotonicity Preserving</i>
MUSCL	<i>Monotonic Upwind Scheme for Conservation Laws</i>
NA	<i>Noble-Abel</i>
O	Représentation symbolique de l’oxydant
P	Représentation symbolique des produits de combustion
PDE	<i>Pulsed Detonation Engine</i>
PDEs	<i>Partial Differential Equations</i>
PG	<i>Perfect gas</i>
PPM	<i>Piecewise Parabolic Method</i>
QSSA	<i>Quasi-Steady-State Approximation</i>
RDE	<i>Rotating Detonation Engine</i>
RESIDENT	<i>REcycling mesh SIMulation of DETonations</i>
TVD	<i>Total Variation Diminishing</i>
vN	von Neumann
WENO	<i>Weighted Essentially Non-Oscillatory</i>
ZND	Zel’dovich-von Neumann-Döring

Symboles Grecs

χ_s	Coefficient isentropique	(-)
Δt	Résolution temporelle	s
Δx	Résolution spatiale	m
γ	Rapport des capacités calorifiques	(-)
λ	Largeur de cellule	m
ν	Coefficient de viscosité cinématique	m ² /s
ν_i	Coefficients stœchiométriques	(-)
$\dot{\xi}$	Variable d'avancement de la réaction chimique	(-)
ρ	Masse volumique	kg/m ³
χ	Paramètre de stabilité de la détonation	(-)
$\dot{\sigma}$	Thermicité	/s
τ	Temps d'induction	s
$\dot{\omega}$	Taux de réaction chimique	/s
ω	Vorticité du champs de vitesse	/s

Symboles Latins

b	Co-volume	m ³ /kg
c	Célérité du son	m/s
c_p	Chaleur spécifique à pression constante du mélange	J/(kg · K)
c_v	Chaleur spécifique à volume constant du mélange	J/(kg · K)
D	Célérité de l'onde de détonation	m/s
E	Énergie totale par unité de masse	J/kg
e	Énergie interne par unité de masse	J/kg
E_a	Énergie d'activation	J/mol
E_a^*	Énergie d'activation réduite	(-)
E_c	Énergie totale des fluctuations de Chu	J/kg
F	Vecteur des flux convectifs dans la direction x	
f	degré de force de la détonation	(-)

G	Vecteur des flux convectifs dans la direction y	
\hat{h}	Enthalpie sensible	J/kg
h	Enthalpie absolue	J/kg
h_c	Hauteur critique	m
h_r	Hauteur de la couche de gaz réactif	m
h_t	Épaisseur hydrodynamique	m
l_{ind}	longueur d'induction	m
L_x, L_y, L_z	Dimensions du domaine de calcul	m
$l_{1/2}$	Demi-longueur de réaction	m
\dot{m}	Débit massique	kg/s
M	Nombre de Mach	(-)
N	Nombre d'espèces chimiques	(-)
$N_{1/2}$	Nombre de mailles de calcul par demi-longueur de réaction	(-)
p	Pression du fluide	Pa
\mathcal{Q}	Critère \mathcal{Q} , second invariant du gradient de vitesse	-
Q	Taux de dégagement d'énergie	J/kg
q	Chaleur de réaction	J/kg
R	Constante spécifique des gaz parfaits	J/(kg · K)
R_u	Constante universelle des gaz parfaits	J/(mol · K)
S	Vecteur des termes sources	
T	Température	K
U	Vecteur des variables conservatives	
u, v, w	Composantes du vecteur vitesse	m/s
v	Volume spécifique	m ³ /kg
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	

W	Masse molaire	kg/mol
X	Fraction molaire	(-)
Y	Fraction massique	(-)
Z	Ratio des impédances acoustiques	(-)

Introduction

Le contexte mondial actuel est marqué par une augmentation importante de la demande énergétique. La consommation s'est vue multipliée par vingt entre le début du XXe siècle et le XXIe siècle avec une augmentation de la population mondiale [1]. Cette croissance a engendré une forte dépendance aux énergies fossiles qui a atteint 81.8% de la consommation globale en 2017. La transition énergétique est alors une réponse nécessaire aux problématiques du modèle actuel. Celles-ci se dénombrent par : des ressources fossiles plus rares et difficiles à extraire, des dommages économiques et sociétaux occasionnés par les modes de production et de consommation de ces énergies, des risques géopolitiques qui compliquent les approvisionnements, et des dégradations alarmantes de l'environnement, illustrées par le réchauffement climatique. L'ensemble des pouvoirs publics ainsi que la communauté scientifique se sont orientés vers une volonté d'augmenter la part des énergies renouvelables dans le panorama énergétique actuel. Parmi ces ressources alternatives, on distingue l'utilisation des combustibles alternatifs, tel que les biocarburants et le développement de nouvelles méthodes de conversion d'énergie, tel que les panneaux solaires ou les éoliennes. Malgré les efforts déployés, une totale indépendance des énergies fossiles n'est pas encore avérée. Toutefois, en absence d'une rupture technologique, une amélioration des méthodes de transformation de cette énergie est nécessaire.

Les secteurs de l'aéronautique et de l'aérospatiale sont aujourd'hui en pleine mutation. Ce domaine est en pleine évolution avec d'un coté, la volonté de nouveaux combustibles à faible empreinte environnementale, comme l'hydrogène et de l'autre la conquête martienne par des fusées réutilisables [2, 3]. Cependant, la consommation énergétique associée demeure importante avec une empreinte environnementale conséquente. Afin de répondre à ces contraintes, un certain nombre de recherches se sont orientées vers des moyens de propulsion innovants pour concilier l'amélioration des performances et le respect des normes. Le moteur à détonation rotative (RDE) a bénéficié d'un intérêt considérable par la communauté scientifique [4]. Le système repose sur la propagation continue et autonome d'ondes de détonation contenues dans une chambre annulaire. La compréhension approfondie des phénomènes physiques ayant lieu dans un tel système est nécessaire afin de pouvoir optimiser la conception et l'utilisation de ces moteurs.

En outre, l'utilisation d'un vecteur énergétique tel que l'hydrogène présente une solution moins polluante et durable [5]. Cependant, des difficultés de stockage, de transport et les risques d'accidents industriels présentent un challenge de taille. De part sa volatilité, des fuites de ce gaz dans l'atmosphère et sa rencontre avec l'air ambiant pourrait induire un

mélange réactif susceptible d’amorcer une explosion dévastatrice. La compréhension des conditions qui favorisent la propagation des déflagrations et surtout des détonations est nécessaire afin d’éviter leurs apparition.

Les phénomènes de détonation d’une manière générale restent une problématique d’actualité. Les études expérimentales montrent des limitations importantes dans le développement des diagnostics. Les accès optiques et les outils de mesure sont relativement difficiles et limités. La simulation numérique offre une solution alternative qui peut reconstruire fidèlement la physique recherchée. Cependant, des difficultés importantes sont aussi à rapporter. En effet, les échelles caractéristiques de la détonation balayent plusieurs ordres de grandeur. Le front de détonation se propage à une célérité de 1 à 3 km/s. La longueur d’induction l_{ind} post-choc mesure quelques microns $\mathcal{O}(\mu\text{m})$. Or le front réactif de la détonation intrinsèquement instable va développer des instabilités cellulaires dont la taille transverse est de $\mathcal{O}(\text{mm-cm})$, après avoir parcouru une distance caractéristique de $\mathcal{O}(\text{m})$. Ainsi près de six ordres de grandeur en espace séparent l’échelle de référence l_{ind} de celle du dispositif expérimental. Néanmoins, l’augmentation des ressources numériques permettrait d’accéder à une certaine finesse d’analyse répondant aux problématiques actuelles concernant les détonations, au vu des limitations des diagnostics expérimentaux vis-à-vis de ce phénomène très rapide.

Ce travail de thèse s’inscrit dans une optique de développement d’outils numériques en vue d’améliorer la modélisation et l’analyse de la détonation. Les conditions rencontrées dans RDE à savoir : les pressions initiales d’injection éventuellement élevées de gaz frais, le confinement par gaz inerte et la nature tri-dimensionnelle du moteur seront utilisées comme référence. Ces conditions sont partagées par la problématique de la sécurité des procédés industriels. L’étude comporte trois parties distinctes. La première est de mettre en évidence l’influence de l’équation d’état sur la structure cellulaire de la détonation dans des milieux à haute pression. Deux équations d’état de type gaz parfaits et Noble-Abel sont employées. Ensuite, la cinétique chimique est étudiée à travers plusieurs modèles de complexité croissante afin d’observer son influence sur des détonations en présence de pertes par confinement inerte. Finalement, la structure multidimensionnelle de la détonation est étudiée à travers une comparaison de simulations 2-D et 3-D. Des outils statistiques ont été implémentés pour proposer un spectre d’analyse plus élargi que celui lié à la structure instantanée de la détonation.

Ce mémoire est constitué de 6 chapitres. Le chapitre 1 présente des généralités sur les détonations. Le chapitre 2 introduit les équations générales qui gouvernent le problème. Le chapitre 3 décrit les outils numériques utilisés et présente le code RESIDENT développé par l’équipe. Le chapitre 4 aborde l’influence de l’équation d’état sur la structure cellulaire

de la détonation gazeuse dans les milieux à haute pression. Le chapitre 5 expose l'influence de la cinétique chimique sur les détonations non-idéales. La simulation numérique des détonations multidimensionnelles sera présentée dans le chapitre 6. Une conclusion et des perspectives seront tirées des études précédentes afin de suggérer de futures recherches visant à compléter ce travail.

Généralités sur les détonations gazeuses

Sommaire

1.1	Modèle de Chapman-Jouguet	6
1.2	Modèle de Zel'dovich, Von Neuman et Döring	9
1.3	Dynamique du front de détonation	13
1.3.1	Analyse de stabilité linéaire	13
1.3.2	Analyse non-linéaire	14
1.3.3	Influence de la chimie sur la stabilité des détonations	16
1.4	Structure cellulaire d'une détonation	18
1.4.1	Prédiction de la taille des cellules	22
1.5	Épaisseur hydrodynamique	23
1.6	Amorçage des détonations	24
1.7	Influence des conditions aux limites	25
1.7.1	Détonations dans des confinements rigides	26
1.7.2	Détonations confinées par un gaz inerte	27
1.8	Synthèse partielle	31

L'observation des phénomènes complexes tels que les ondes de détonations gazeuses passent par la conjonction de multiples notions fondamentales qui seront brièvement rappelées. La détonation est un front de combustion, qui se propage à une vitesse supersonique par rapport aux gaz frais [6]. Les réactifs se déplacent alors en aval du choc incident. Chapman et Jouguet [7] ont posé les premières briques de compréhension, l'épaisseur de réaction étant négligée. Puis plus tard, le modèle stationnaire de Zel'dovich, Von Neumann et Döring (ZND) a permis de décrire la structure laminaire de la détonation, dont l'analyse permet de distinguer les longueurs chimiques d'induction et de réaction. Cependant, la détonation gazeuse est intrinsèquement instable et finit par développer une structure cellulaire dans le cas multidimensionnel, dont la longueur de cellule est une des caractéristiques du pré-mélange réactif. L'analyse de stabilité linéaire a permis de mettre en évidence les paramètres les plus influents. Néanmoins, les simulations numériques permettent d'accéder

également à toute la dynamique non-linéaire du front de détonation. Ainsi, la détonation peut être décrite comme un oscillateur harmonique, qui va avoir un comportement périodique, puis donner lieu à des phénomènes de doublement de périodes pour laisser place à un comportement chaotique. Dans le cas qui nous intéresse plus spécifiquement, la détonation est auto-entretenu, et une frontière sonique s'établit en aval du front de choc incident, qui l'isole des perturbations en aval. La distance moyenne entre le front de choc et la frontière sonique est l'épaisseur hydrodynamique.

Les deux méthodes d'amorçage sont ensuite sommairement décrites : méthode d'amorçage directe et transition de la déflagration à la détonation.

L'influence du confinement sur la détonation gazeuse sera ensuite détaillée, car il peut être défavorable à leur propagation et engendrer leur extinction.

1.1 Modèle de Chapman-Jouguet

Les premiers éléments de cette théorie ont été énoncés par Chapman [8] et Jouguet [7] (CJ) au début du XX^e siècle. Selon cette théorie, l'onde de détonation est assimilée à une discontinuité plane, autonome et stationnaire se propageant à une célérité constante D , au travers de laquelle les gaz frais sont transformés en gaz brûlés.

Les grandeurs thermodynamiques subissent un saut, d'un état initial indicé 0 avec une composition chimique figée, à un état final noté CJ qui est à l'équilibre thermochimique. La vitesse du milieu dans le repère lié à la discontinuité réactive est noté w et les grandeurs thermodynamiques sont la pression p , la température T et la masse volumique ρ , comme représenté sur la Figure 1.1. Les équations de conservation de la masse, de la quantité de

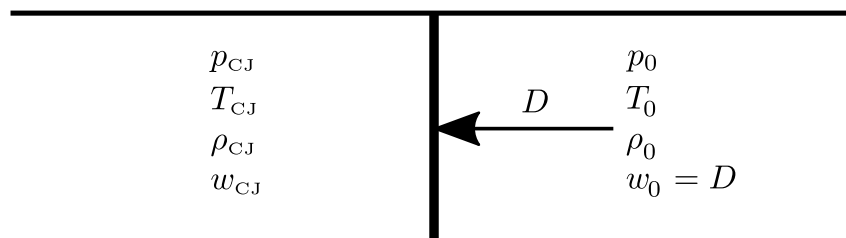


FIGURE 1.1 – Représentation d'une onde détonation selon du modèle CJ. La propagation est ici représentée dans le repère lié à la discontinuité réactive. Le milieu initial est au repos.

mouvement et de l'énergie à travers la discontinuité s'écrivent :

$$\rho w = \rho_0 w_0 \quad (1.1)$$

$$p + \rho w^2 = p_0 + \rho_0 w_0^2 \quad (1.2)$$

$$h + \frac{w^2}{2} = h_0 + \frac{w_0^2}{2} \quad (1.3)$$

L'indice CJ a été omis pour des raisons de simplification d'écriture. La combinaison des équations de masse 1.1 et de quantité de mouvement 1.2 permet d'obtenir la droite de Rayleigh (\mathcal{RM}) :

$$(\mathcal{R}) : p - p_0 = \rho_0^2 D^2 \left(\frac{1}{\rho} - \frac{1}{\rho_0} \right) \quad (1.4)$$

où D est la célérité de l'onde de détonation. En éliminant les termes de vitesse dans l'équation d'énergie, en s'appuyant sur les équations de continuité et de quantité de mouvement, l'équation de l'adiabatique de Crussard (\mathcal{C}) s'exprime dans le même plan $(p, 1/\rho)$ que celui de la droite de Rayleigh-Michelson sous la forme :

$$(\mathcal{C}) : h - h_0 = \frac{1}{2}(p - p_0) \left(\frac{1}{\rho} + \frac{1}{\rho_0} \right) \quad (1.5)$$

Il est possible de faire apparaître la chaleur de réaction massique q , différence entre les enthalpies de formation entre les réactifs et les produits, à la température de référence.

L'intersection de la courbe de Crussard avec la droite de Rayleigh-Michelson nous renseigne sur l'état final derrière l'onde de détonation. La Figure 1.2 représente les différents cas envisageables de la droite de Rayleigh-Michelson par rapport à la position de la courbe de Crussard dans le plan $(p, 1/\rho)$. L'état initial étant au repos, la pente de la droite est donnée par la vitesse de l'onde D . Plusieurs cas sont alors envisageables :

- La droite de Rayleigh-Michelson ne possède aucune intersection avec l'adiabatique de Crussard pour ($D < D_{\text{CJ}}$).
- La droite de Rayleigh-Michelson est tangente à la courbe de Crussard. Les auteurs Chapman et Jouguet ont montré que ce cas permet de définir les conditions de propagation d'une détonation autonome et stationnaire. L'état final est alors atteint quand le nombre de Mach de l'écoulement est l'unité, minimisant ainsi l'entropie. Par conséquent, la vitesse de propagation de la détonation est minimale, i.e., $D_{\text{CJ}} = u_{\text{CJ}} + c_{\text{CJ}}$. Cette configuration assure ainsi une barrière sonique dans les gaz brûlés. Ainsi, toute perturbation en aval du front de la détonation ne peut rattraper ce dernier et l'affaiblir.
- La droite de Rayleigh-Michelson possède deux interactions avec l'adiabatique de Crussard noté F et f. La vitesse de la détonation est supérieure à la célérité D_{CJ} . Le

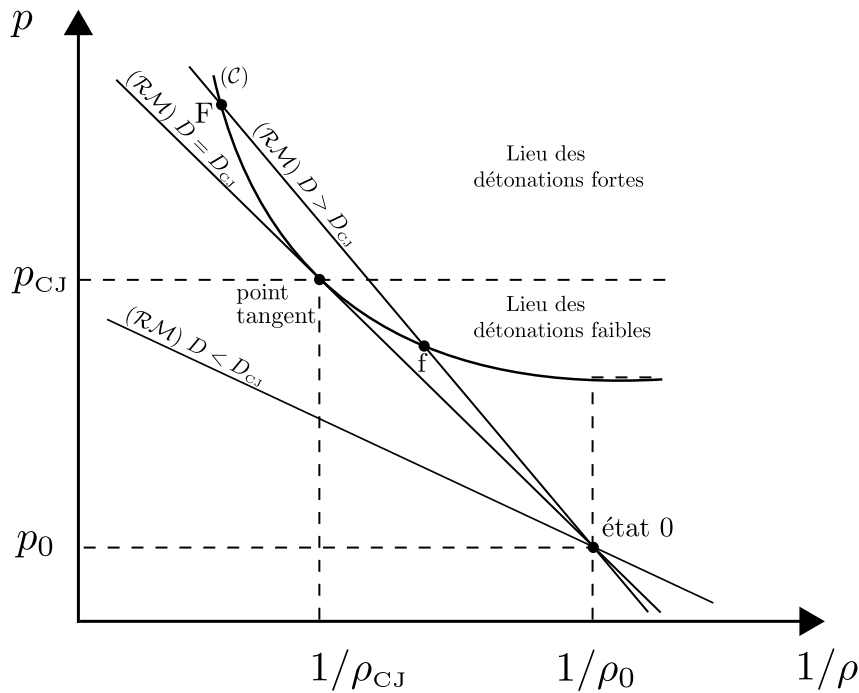


FIGURE 1.2 – Représentation dans le diagramme $(p, 1/\rho)$ des positions de la droite de Rayleigh-Michelson (\mathcal{RM}) par rapport à l'adiabatique de Crussard (\mathcal{C}) selon la célérité D de l'onde de détonation. Les indices 0 et CJ correspondent à l'état initial et de Chapman-Jouguet, respectivement.

point F se situe sur la branche des détonations fortes de l'adiabatique de Crussard. Sur cette branche, la pression est supérieure à celle de l'état CJ. L'écoulement en aval étant subsonique par rapport au front, sa célérité est alors déterminée par les conditions arrière, comme par exemple la vitesse d'un piston. Par conséquent, cette solution ne peut être considérée comme autonome. En absence d'un phénomène qui le maintiendrait à des conditions "sur-comprimées" au-delà de l'état CJ, la détonation forte s'affaiblit pour atteindre l'état autonome CJ. Le point f se situe sur la branche des détonations faibles.

Le point de tangence entre la courbe de Crussard et la droite de Rayleigh permet de fermer le système d'équations sans tenir compte du mécanisme de propagation de la détonation.

$$\left. \frac{\partial p}{\partial(1/\rho)} \right|_{(\mathcal{RM})} = \left. \frac{\partial p}{\partial(1/\rho)} \right|_{(\mathcal{C})} \quad (1.6)$$

Dans le cadre de l'hypothèse des gaz parfaits et où les masses molaires et capacités calorifiques sont constantes, une solution analytique peut être trouvée [9]. Une solution

approchée dans le cas des chocs forts ($p \gg p_0$ et $M_0 \gg 1$) peut également être obtenue :

$$\frac{\rho_{\text{CJ}}}{\rho_0} \approx \frac{\gamma + 1}{\gamma} \quad (1.7)$$

$$\frac{p_{\text{CJ}}}{p_0} \approx \frac{\gamma}{\gamma + 1} M_0^2 \quad (1.8)$$

$$\frac{T_{\text{CJ}}}{T_0} \approx \left(\frac{\gamma}{\gamma + 1} \right)^2 M_0^2 \quad (1.9)$$

$$c_{\text{CJ}} \approx \frac{\gamma D_{\text{CJ}}}{\gamma + 1} \quad (1.10)$$

$$u_{\text{CJ}} \approx \frac{D_{\text{CJ}}}{\gamma + 1} \quad (1.11)$$

$$D_{\text{CJ}} \approx \sqrt{2q(\gamma^2 - 1)} \quad (1.12)$$

où γ est le coefficient polytropique, et $M_0 = D_{\text{CJ}}/c_0$ le nombre de Mach du front de détonation.

Bien que ce modèle décrit simplement le passage de l'état initial des gaz frais à l'état final des gaz brûlés à l'équilibre thermodynamique et chimique, il est toutefois à constater que ce modèle n'indique aucune information sur l'évolution que subit le système entre ces deux états.

1.2 Modèle de Zel'dovich, Von Neuman et Döring

Le modèle CJ est basé sur une analyse thermodynamique de l'écoulement. Afin de décrire la structure interne du front de détonation, des chercheurs ont proposé un modèle plus complet, qui s'appuie sur une structure imaginée un demi-siècle auparavant par Vielle [10], selon laquelle une détonation est composée d'un choc inerte immédiatement suivi d'une zone de réaction. Et c'est ainsi que le modèle ZND, qui s'appuie sur la solution 1-D des équations d'Euler réactives a été élaboré de façon indépendante par Zel'dovich [11], von Neumann [12] et Döring [13].

L'état post-choc est l'état von Neumann (vN). Après une longueur d'induction où des radicaux sont créés, les gaz frais choqués sont brûlés dans la zone de réaction. Lorsqu'on se place dans le repère lié au choc, la libération d'énergie engendre une accélération de l'écoulement atteignant la vitesse locale du son à la fin de la zone de réaction. Dans ce cas, la détonation est autonome. Les hypothèses du modèle ont été rappelés par Fickett et Davis [9] et s'énoncent comme suit :

- L'écoulement est stationnaire et monodimensionnel entre les états vN et CJ.

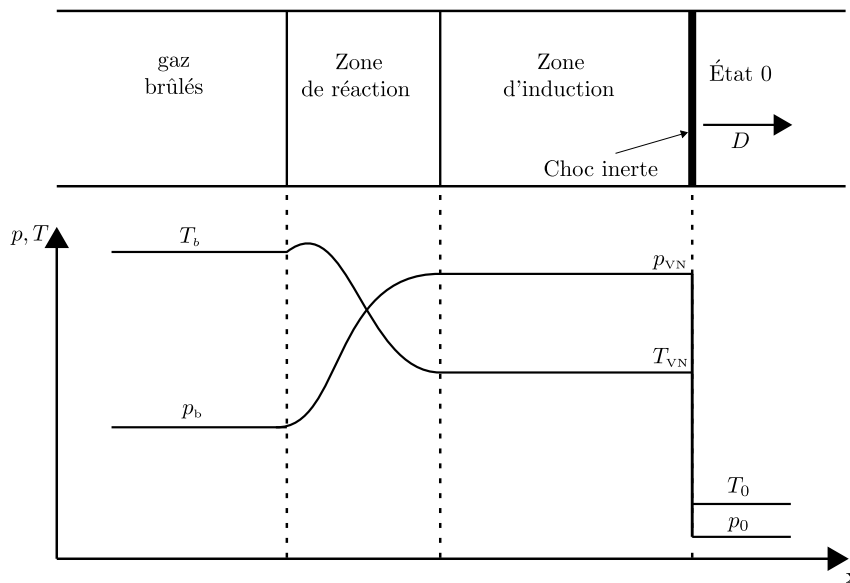


FIGURE 1.3 – Structure interne de l’onde de détonation selon la description du modèle ZND.

- Le choc précurseur est une discontinuité où les phénomènes de transport (conduction, diffusion et viscosité) et les transport réactifs sont négligés.
- Toutes les variables thermodynamiques à l’exception de la composition chimique sont localement en équilibre thermodynamique.

La Figure 1.3 décrit la structure de l’onde de détonation ainsi que l’évolution des paramètres thermodynamiques tels que la pression et la température à travers les différentes étapes de cette structure. Au passage du choc, le milieu réactif est à l’état de von Neumann (vN), de pression p_{vN} et de température T_{vN} . Elle est supérieure à la température de l’auto-inflammation du mélange. Ce pic correspond à l’intersection de la courbe d’Hugoniot (représentant l’ensemble des états choqués inertes pouvant être obtenus à partir de l’état initial 0) avec la droite de Rayleigh-Michelson. Dans la zone d’induction, les variables thermodynamiques évoluent peu par rapport à l’état vN. Les réactions chimiques s’opérant dans cette zone sont généralement des réactions d’initiation et de ramification où des radicaux sont produits et propagés. Une fois que la production suffisante de radicaux est atteinte à la fin de la zone d’induction, des réactions de terminaison sont activées, engendrant ainsi un dégagement de chaleur dans la zone de réaction. Sur un diagramme $(p, 1/\rho)$, l’évolution des variables thermodynamiques peut être modélisée à travers la courbe de Crussard et la droite de Rayleigh-Michelson. En effet, l’augmentation de la pression et de la densité à travers le choc suit la courbe dite d’Hugoniot (\mathcal{H}) qui n’est autre que la courbe de Crussard (\mathcal{C}) inerte. Le milieu passe ainsi de l’état initial 0 vers l’état vN le long de cette courbe. La réaction chimique engendre le dégagement d’énergie nécessaire permettant le passage de l’état VN vers l’état CJ le long de la droite de Rayleigh-Michelson

(\mathcal{RM}) comme l'atteste la figure 1.4. La vitesse des gaz brûlés est subsonique par rapport à celle du choc et subit une accélération jusqu'à atteindre la vitesse du son au point CJ. En

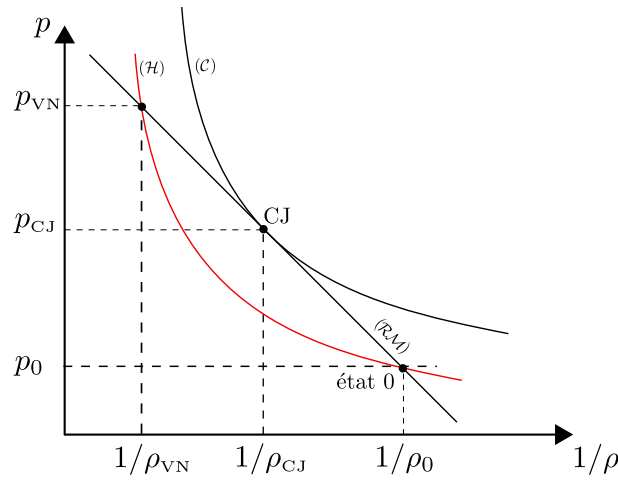


FIGURE 1.4 – Représentation schématique de l'évolution des variables thermodynamiques dans le diagramme $(p, 1/\rho)$ telle que décrite par le modèle ZND.

s'appuyant sur les hypothèses énoncées précédemment et en considérant un mécanisme réactif réduit à une étape globale ainsi que des propriétés thermodynamiques constantes, les équations de conservation décrivant le modèle ZND peuvent être écrites pour un gaz parfait dans le repère du choc sous la forme non-conservative suivante :

$$\frac{d\rho u}{dx} = 0 \quad (1.13)$$

$$\frac{dp}{dx} + \rho u \frac{du}{dx} = 0 \quad (1.14)$$

$$\frac{\gamma}{\gamma - 1} \frac{d(p/\rho)}{dx} + u \frac{du}{dx} - Q \frac{dY_f}{dx} = 0 \quad (1.15)$$

$$\rho u \frac{dY_f}{dx} = \dot{\omega} \quad (1.16)$$

avec Y_f la fraction massique des gaz frais et $\dot{\omega}$ le taux de réaction massique qui s'exprime

$$\dot{\omega} = \rho(1 - Y_f) \exp(-E_a/R_u T) \quad (1.17)$$

où E_a l'énergie d'activation et R_u la constante universelle des gaz parfaits. La quantité QdY_f/dx représente le taux de dégagement de chaleur de réaction. Les équations 1.13, 1.14 et 1.15 peuvent être intégrées entre $Y_f = 0$ jusqu'à $Y_f \neq 0$, $Y_f \leq 1$. Pour une détonation autonome, la fraction massique Y_f atteint l'unité quand l'écoulement atteint les conditions CJ. Cependant, si à l'état finale $Y_f < 1$, la détonation n'est plus considérée autonome et soutenue par un piston d'une vitesse $D > D_{CJ}$. Afin de déterminer les états thermodynamiques intermédiaires pour chaque valeur de Y_f , l'équation 1.15 peut être intégrée, en utilisant l'expression de la vitesse du son $c = \sqrt{\gamma p/\rho}$ et par la connaissance des conditions

initiales :

$$\frac{1}{\gamma - 1}c(x)^2 + \frac{1}{2}u(x)^2 - QY_f(x) = \frac{1}{\gamma - 1}c_0^2 + \frac{1}{2}D^2 \quad (1.18)$$

Il est à noter qu'à $x = 0$, l'équation 1.15 admet deux solutions, une solution où l'état initial est celui du milieu frais 0 avec $Y_f = 0$, $u = D$ et $c = c_0$ et une solution où l'état initial est celui de von Neumann (vN) pour lequel $Y_f = 0$, $u = u_{vN}$ et $c = c_{vN}$ comme l'atteste la Figure 1.4. On peut ainsi conclure que pour toute condition initiale $(p_0, 1/\rho_0)$, la structure interne de la détonation ainsi que sa vitesse peuvent être complètement retrouvées en déterminant la valeur de $Y_f(x)$ (Équation 1.18).

L'expression de la dérivée de la vitesse à travers l'équation d'énergie 1.15 obtenue en remplaçant les dérivées de la pression et de la densité données par les équations 1.13 et 1.14 s'écrit

$$\frac{du}{dx} = (\gamma - 1)Q \frac{dY_f}{dx} \frac{u}{c^2 - u^2} \quad (1.19)$$

La solution de l'équation 1.19 dans l'espace des phases $u^2 - Y_f$ permet d'obtenir des informations sur le comportement du modèle. En la multipliant par $2u$ dans les deux côtés de l'égalité, il vient alors

$$\frac{du^2}{dY_f} = 2(\gamma - 1)Q \frac{u^2}{c^2 - u^2} \quad (1.20)$$

Sachant que la vitesse du son c^2 peut être obtenue à tout instant par la connaissance de u^2 et Y_f à travers l'équation 1.18, la solution de l'équation 1.20 représente une trajectoire traversant les conditions initiales 0 et vN dans l'espace des phases $u^2 - Y_f$. Le diagramme des phases est représenté dans la Figure 1.5. Les trajectoires en trait plein représentent les solutions physiques du problème pour $D \geq D_{CJ}$. Elles décrivent le passage d'un état post-choc vN où $Y_f = 0$ vers un état final où $Y_f = 1$. La vitesse de l'écoulement u dans le repère lié à la détonation est une fonction croissante de Y_f car l'écoulement est subsonique. Dans le cas où les conditions finales sont à l'état CJ, la tangente de la trajectoire est verticale en ce point $Y_f = 1$ et la vitesse de l'écoulement $u_{CJ} = c_{CJ}$. Les trajectoires montrées en traits discontinus permettant de connecter l'état 0 à l'état final décrivent un écoulement supersonique où la vitesse u est une fonction décroissante avec le dégagement d'énergie. Ces solutions ne sont pas physiques et n'ont jamais été observées expérimentalement. En outre, pour un front se déplaçant à $D < D_{CJ}$, il n'existe pas de solution pour le système d'équations. Ainsi, l'ensemble des solutions physiques sont contenues entre les deux courbes en traits pleins dans le diagramme.

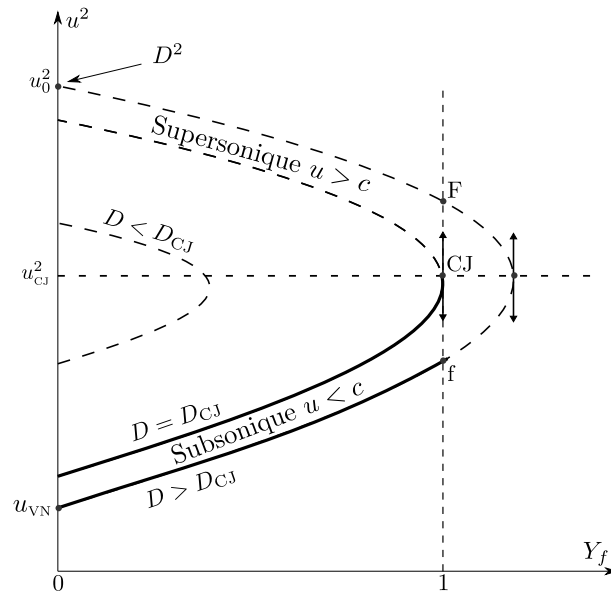


FIGURE 1.5 – Solution de l'équation 1.20 dans le diagramme de phases $(u^2 - Y_f)$, adapté des travaux de Clavin et Searby [14].

1.3 Dynamique du front de détonation

Les détonations sont généralement instationnaires et ont un comportement instable. La connaissance des effets de l'instabilité sur la dynamique des ondes de détonation permet d'appréhender les propriétés du mélange explosif tel que les limites de propagation, l'énergie nécessaire à son amorçage, etc... Les réactions chimiques qui s'opèrent dans l'écoulement sont en effet très sensibles aux perturbations engendrées par la variation de la température dans la zone d'induction. Les perturbations vont ainsi modifier la longueur d'induction et par voie de conséquence, la zone de réaction exothermique. Les ondes de pression qui en résultent vont alors perturber la dynamique du front de choc incident. Une boucle rétroactive va alors s'installer entre le front de choc et la zone de réaction, provenant de ces allers-retours d'ondes. Deux méthodes d'analyse de stabilité linéaire sont rappelées ci-après. Une liste plus exhaustive et plus détaillée des méthodes analytiques peut être trouvée dans Lee [15] et Clavin et Searby [14].

1.3.1 Analyse de stabilité linéaire

Cette méthode consiste à appliquer des perturbations instationnaires au modèle ZND et établir une relation de dispersion entre le taux d'amplification et la longueur d'onde de la perturbation. Ces résultats permettent de définir une région de stabilité de la solution dans l'espace des paramètres utilisés et offre une bonne estimation du taux d'amplification des perturbations, dans les premiers temps.

Les premières études de stabilité ont été formalisées puis intensivement étudiées par Erpenbeck [16-18] en s'appuyant sur une approche par transformation de Laplace. Une formulation à travers les modes normaux a été proposée par Lee et Stewart [19] puis étendue par d'autres travaux [20-27]. Ces études, basées sur une modélisation chimique simplifiée ont permis d'identifier l'influence des différents paramètres régissant les limites de stabilité de la détonation, à savoir la vitesse du piston soutenant la détonation, le degré de force $f = (D/D_{CJ})^2$, E_a : énergie d'activation, Q : taux de dégagement d'énergie et γ le rapport des capacités calorifiques. Une variation de l'un de ces paramètres permet le passage d'une détonation stable à une détonation instable et inversement. Ces observations ont été rapportées par Short [26] où l'auteur explique qu'elles sont étroitement liées au changement dans le taux de dégagement d'énergie. En effet, plus le taux de dégagement d'énergie est rapide plus la détonation est instable. En revanche, la stabilité de la détonation est obtenue pour une augmentation de la vitesse du piston, la diminution de l'énergie d'activation ou la diminution du taux de dégagement de chaleur.

Après un temps suffisamment long, les effets non-linéaires vont dominer sur la dynamique linéaire. L'analyse de stabilité non-linéaire est considérée comme une étape importante après l'analyse linéaire pour la compréhension des mécanismes physiques régissant l'instabilité des détonations.

1.3.2 Analyse non-linéaire

Une méthode alternative permettant d'étudier l'instabilité des détonations consiste à intégrer, en s'appuyant sur les méthodes numériques, les équations d'Euler réactives, unidimensionnelles. L'instabilité du front de détonation s'illustre à travers un comportement pulsatoire suivant la direction de propagation. Les paramètres contrôlant le déclenchement de l'instabilité sont les mêmes que dans le cas de l'analyse linéaire. Cependant, la sensibilité de la réaction chimique aux variations de la température dans la zone d'induction semble être le plus important des paramètres contrôlant la stabilité de la détonation [28]. Dans le cas d'une modélisation avec une réaction chimique globale, elle s'illustre à travers l'augmentation de l'énergie d'activation réduite ($E_a^* = E_a/(RT_0)$).

L'augmentation des instabilités dans le temps est observée à travers les fluctuations de la pression post-choc. La Figure 1.6 montre l'évolution de cette pression en fonction du temps pour différentes énergies d'activation. La pression est normalisée par p_{vN} donnée par les relations de Rankine-Hugoniot. Les paramètres thermodynamiques utilisés, sont $\gamma = 1.2$ et $Q = 50$. Pour une faible énergie d'activation faible $E_a^* < 25.26$, les oscillations engendrées par l'amorçage de la détonation sont amorties et l'amplitude du choc précurseur

devient constante. Ainsi, la détonation est stable et stationnaire. Au-delà de cette énergie d'activation, des oscillations apparaissent faisant varier l'amplitude du choc. Entre les énergies d'activation de 25.24 et de 27.00, les oscillations sont harmoniques avec une seule amplitude et une période constante. Les détonations avec une énergie d'activation plus importante exhibent des instabilités non-linéaires avec des oscillations à deux périodes, voire à quatre périodes. Finalement, l'augmentation de l'énergie d'activation va entraîner un dédoublement des périodes, jusqu'à ce que le comportement devienne apériodique et transite vers un comportement chaotique [29]. Le dédoublement de périodes en cascade

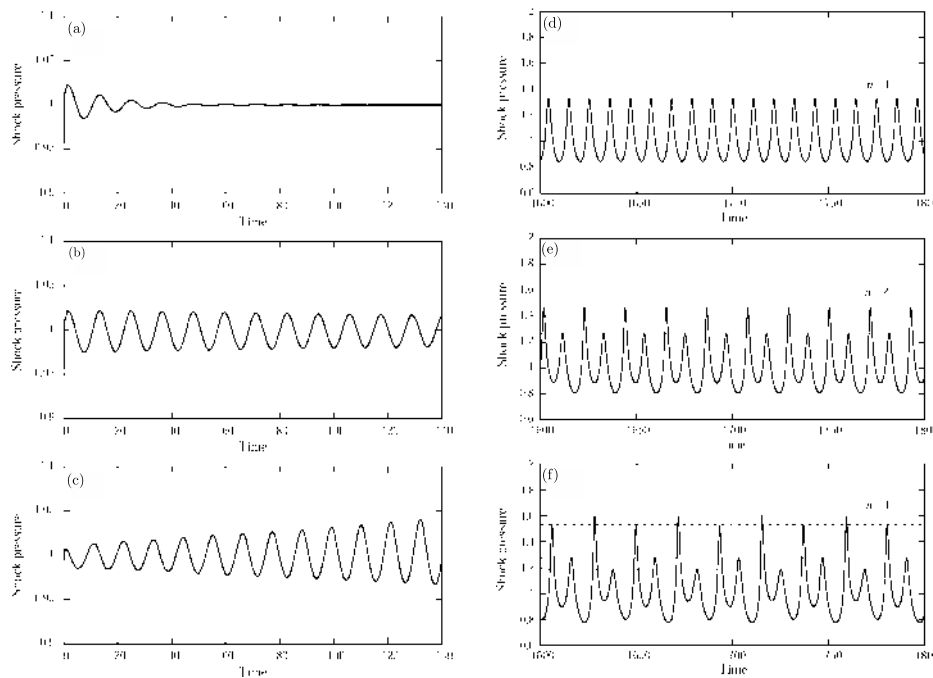


FIGURE 1.6 – Évolution temporelle de la pression post-choc pour les différentes énergies d'activation : $E_a^* = 24$ (a), $E_a^* = 25.24$ (b), $E_a^* = 25.28$ (c), $E_a^* = 27$ (d), $E_a^* = 27.40$ (e), $E_a^* = 27.8$ (f) [30]. La pression est normalisée par p_{vN} .

permet de construire un diagramme de bifurcation en comptant le nombre de maxima pour chaque énergie d'activation. Cette construction permet alors de caractériser les changements opérants dans la dynamique du front en fonction de l'énergie d'activation. La Figure 1.7 montre le diagramme de bifurcation correspondant aux maxima des oscillations de vitesse du front de détonation en fonction de l'énergie d'activation [31]. Pour une énergie d'activation $E_a^* < 25.265$, le front n'exhibe aucune oscillation. La limite de cette zone est appelée la limite neutre de stabilité. Au-delà de cette limite, le front arbore des oscillations avec un pic d'amplitude croissante avec l'énergie d'activation. On observe une bifurcation à 27.1875 et finalement, une succession de bifurcations au delà de 27.8 transitant vers le chaos. Ce comportement est analogue à l'évolution d'un système dynamique, tel que celui

des suites logistiques ou dans d'autres modèles mathématiques [32].

Il est important de souligner que la valeur d'énergie d'activation pour laquelle la transition s'opère est dépendante du choix des paramètres thermodynamiques (γ, Q) ainsi que le degré de force $f = (D/D_{CJ})^2$. En effet, un changement dans ces paramètres pourrait occasionner un avancement ou un retardement dans la transition.

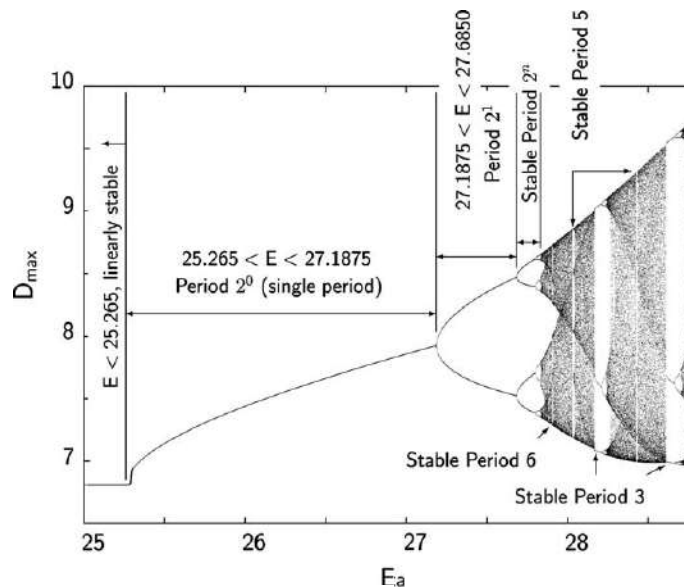


FIGURE 1.7 – Diagramme de bifurcation des maxima d'oscillations de vitesse du front de détonation en fonction de l'énergie d'activation réduite E_a^* [31].

1.3.3 Influence de la chimie sur la stabilité des détonations

La section précédente montre que la chimie joue un rôle important dans la stabilité des détonations. Les résultats sont obtenus en utilisant une chimie globale à une étape de type Arrhenius. Dans la pratique, le front de réaction est composé d'une zone d'induction suivie immédiatement d'une zone de réaction où l'énergie de la combustion est libérée. Le modèle à une étape ne permet pas de distinction entre ces deux zones. Afin d'être représentatif, plusieurs auteurs ont proposé des mécanismes chimiques réduits à travers lesquels l'instabilité de la détonation a été étudiée. Les premières études asymptotiques et numériques de stabilité non-linéaire avec une chimie plus complexe a été proposée par Short [33] en utilisant un modèle de chimie à trois étapes. Le modèle consiste en deux réactions en chaîne dont la réaction d'initiation à travers laquelle le combustible est converti en radicaux suivie d'une réaction de terminaison à travers laquelle les radicaux sont convertis en produits de combustion. Le dégagement d'énergie s'opère au niveau de la réaction de terminaison. Ce modèle a été ensuite encore simplifié en deux étapes

d'induction et de réaction. L'avantage de ces modèles par rapport à celui à une étape globale consiste dans une séparation claire entre la zone d'induction dépendante de la température et la zone de réaction exothermique. Les paramètres du modèle sont obtenus à travers une comparaison par des temps d'induction avec la chimie détaillée [34, 35] dans le cadre d'un processus de combustion à volume constant. En utilisant ce modèle, Short et Sharpe [36] ont trouvé que l'instabilité de la détonation est influencée d'une manière complètement indépendante par le changement dans le taux de réaction chimique et le changement dans la longueur de la zone de réaction. La détonation est stable quand la zone de réaction est plus longue que la zone d'induction. En outre, la détonation montre un comportement oscillatoire puis instable quand la longueur de réaction devient plus petite devant la longueur d'induction. Ces observations ont été aussi rapportées par Short et Quirk [24] et Ng et Lee [37] en utilisant un modèle chimique à trois étapes. Short et Sharpe [36] ont conclu que la limite de stabilité est atteinte quand le rapport entre la longueur d'induction l_{ind} et la longueur de réaction sont du même ordre de grandeur que l'énergie d'activation réduite dans la zone d'induction. Ainsi, pour $l_{ind}/l_R \leq \mathcal{O}(E_I)$, la détonation est instable.

En se basant sur ces analyses théoriques et numériques, Radulescu [38] propose le paramètre χ pour caractériser l'irrégularité de la structure cellulaire d'un ensemble conséquent de pré-mélanges gazeux. Le paramètre de stabilité est alors :

$$\chi = \frac{E_I}{RT_{VN}} \frac{l_{ind}}{l_R} \quad (1.21)$$

La longueur de réaction est définie comme

$$l_r = \frac{u_{CJ}}{\dot{\sigma}_{max}} \quad (1.22)$$

avec u_{CJ} la vitesse dans le repère du choc d'une particule fluide au plan CJ et $\dot{\sigma}_{max}$ la thermicité qui a la dimension de l'inverse d'un temps caractéristique. Pour rappel, pour un modèle chimique à une étape globale, la thermicité est donnée par [39] :

$$\dot{\sigma} = (\gamma - 1) \frac{Q}{c^2} \frac{dY_p}{dt} \quad (1.23)$$

Ng et al. [30] ont étendu le travail de Short et Sharpe [36] à travers une série de simulation numériques 1-D avec une chimie à deux étapes et une chimie détaillée pour un ensemble de pré-mélanges. Le résultat de cette étude paramétrique a permis d'identifier la limite de stabilité basée sur le paramètre χ . La Figure 1.8 résume l'étude dans le plan $\chi - M_{CJ}$ pour différents pré-mélanges à travers une variation de la combinaison de paramètres γ, Q, E_I, E_R . Le choix des paramètres a été fait de sorte à reproduire un ensemble de

pré-mélange réactifs à différentes conditions initiales. Pour chaque combinaison, le rapport entre la longueur d'induction et longueur de réaction a été varié pour chercher la limite de stabilité. Ces limites sont regroupées sur le graphe. La ligne rouge représente la limite de stabilité. L'augmentation de taux de dilution est accompagné par une convergence vers limite de stabilité.

En utilisant les résultats du modèle à deux étapes, Ng et al [40, 41] ont montré que

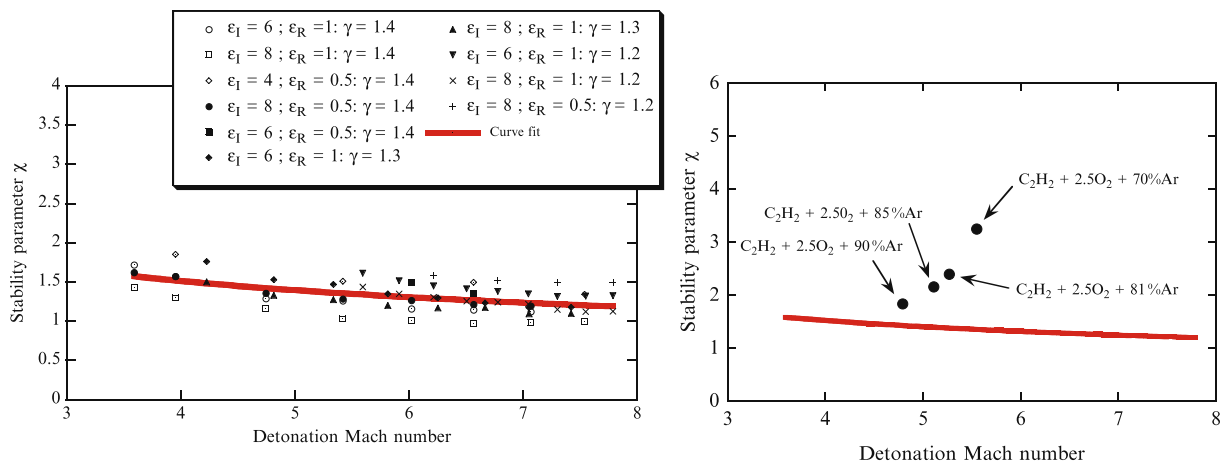


FIGURE 1.8 – gauche : courbe de limite de stabilité obtenue avec une chimie à deux étapes ; droite : Caractérisation des effets de la dilution de l'acétylène C_2H_2 à la stœchiométrie par de l'argon Ar en utilisant le facteur χ [40]

la dilution à l'argon de l'acétylène à la stœchiométrie régularisait les oscillations post-choc. Les mêmes constatations sont observées pour l'hydrogène et sont confirmées par des exemples de simulations avec une chimie détaillée.

Toutes ces constatations corroborent les observations expérimentales sur la régularisation de la structure cellulaire multidimensionnelle par la dilution à l'Argon. Plus récemment, Han et al.[42], en utilisant un schéma cinétique détaillé, ont également confirmé l'intérêt de l'utilisation du facteur χ pour un mélange hydrogène/oxygène à la stœchiométrie, au travers d'une étude paramétrique et systématique de la dilution à l'Argon. Un diagramme de bifurcation a également été construit, analogue à celui de la chimie à une étape globale.

1.4 Structure cellulaire d'une détonation

Les observations expérimentales montrent que la structure de la détonation est bien plus complexe que celle prédite par le modèle ZND. En effet, la surface du front de détonation adopte une structure instationnaire et tri-dimensionnelle. Les premières identifications de ce comportement ont été réalisées à l'aide d'observations expérimentales [43-46]. En effet,

l'utilisation de chronogrammes et d'interférogrammes ont permis de mettre en évidence le comportement pulsatoire de la détonation lorsque celle-ci se propage dans un tube. Néanmoins, les auteurs ont observé que la vitesse moyenne de l'onde est bien celle de CJ malgré les oscillations locales importantes de la vitesse du front. Les auteurs ont attribué ces oscillations à la présence d'ondes de chocs se déplaçant le long du front suivant la direction perpendiculaire au sens de propagation.

Ces ondes transverses sont en effet un élément clé dans la formation de la structure multi-dimensionnelle de la détonation. Dans une configuration de réflexion de Mach les ondes transverses, les chocs incidents et les disques de Mach se rejoignent au point triple, comme l'atteste la Figure 1.9. L'onde transverse a une amplitude qui décroît vers celle d'une onde acoustique à mesure qu'elle s'étend en aval du front. Le front de détonation

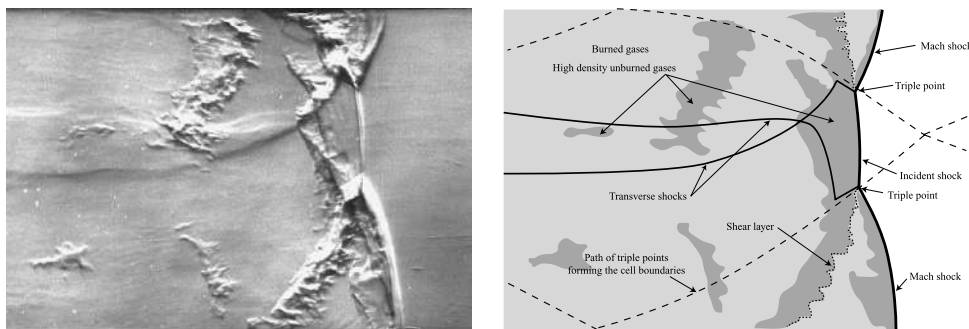


FIGURE 1.9 – Gauche : strioscopie de la structure interne du front de détonation pour un mélange de $\text{CH}_4 + 2\text{O}_2$ à $p_0 = 3.4$ kPa ; Droite : Schéma explicatif des différentes composantes du front [47].

est constitué d'une alternance de ces ondes de choc incidentes et de Mach. L'ensemble des trajectoires des points triples va dessiner la structure cellulaire, typique des détonations. Tout au long de leur propagation au sein d'une cellule représentative, les amplitudes des fronts dues à la présence de gradients réactifs vont progressivement diminuer jusqu'à la collision des ondes transverses et des points triples. Leur interaction est ainsi responsable du comportement oscillatoire de la vitesse locale du front de détonation, qui peut atteindre $1.8 D_{\text{CJ}}$ et décroît jusqu'à $0.6 D_{\text{CJ}}$. La zone d'induction en aval du front peut ainsi augmenter ou diminuer de plusieurs ordres de grandeurs par rapport à celle du modèle ZND, variation qui peut induire des fluctuations significatives dans la zone de réaction et dans le taux de dégagement de chaleur. La Figure 1.9 montre que la zone de réaction est plus longue en aval du choc incident qu'en aval du disque de Mach. Une ligne de glissement sépare les deux zones d'induction correspondantes. La collision de deux points triples est à la source du détachement des poches de gaz imbrûlés, qui sont par la suite convectées dans l'écoulement et consommées progressivement. La collision des points triples va ensuite être à l'origine d'un nouveau cycle et d'une nouvelle cellule.

Au niveau expérimental, la signature du passage de ces ondes sur une paroi d'un canal peut être obtenue à l'aide d'un dépôt de carbone sur la surface de celle-ci [48-50]. En effet, les points triples ont tendance à générer des gradients de pression et de cisaillement suffisamment élevés pour permettre d'arracher ces particules de suies de la paroi. La structure finale sera alors l'historique de la trajectoire des points triples lors de la propagation de la détonation. Un exemple de résultat expérimental de structure cellulaire est montré sur la Figure 1.10. Cette structure sous forme de losanges est communément appelée *structure cellulaire*. Elle est la signature du couplage entre le choc et la zone de réaction, i.e., l'existence d'une détonation lors de l'essai [51]. Une longueur fondamentale

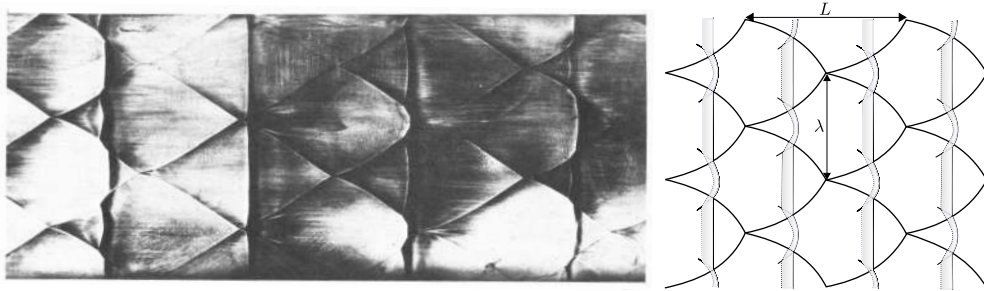


FIGURE 1.10 – Gauche : Exemple d'impression sur plaque de suie de la trajectoire des points triples lors de la propagation de la détonation [52] ; Droite : schéma représentant la trajectoire des points triples, les cellules ayant une taille λ et une longueur L .

dans la détonation est la largeur de la cellule λ . Cette valeur est obtenue en réalisant une moyenne sur l'ensemble des largeurs de cellules sur une plaque de suie. Cette valeur est une propriété intrinsèque de la dynamique des détonations, qui permet de déterminer des caractéristiques de la détonation, tel que le diamètre critique nécessaire à la transmission d'une détonation d'un canal vers un espace non confiné $d_c \propto \lambda$ [53-55], ou encore, l'énergie nécessaire à l'amorçage d'une détonation $E_c \propto \lambda^3$ [56]. La taille de cellule d'une détonation dépend fortement de la composition chimique du mélange, de sa richesse, du taux de dilution de celui-ci ainsi que de la pression et de la température initiales.

La taille moyenne d'une détonation varie sous la forme d'une cloche inversée, le minimum étant atteint au voisinage de la stœchiométrie [57]. Pour une richesse donnée, la dilution permet d'augmenter sensiblement la taille des cellules. La dépendance de la pression initiale suit une corrélation de type $\lambda \sim p_0^{-\alpha}$ avec $1.1 < \alpha < 1.2$ pour une pression qui varie entre 1 – 1000 kPa [58]. Ces comportements sont relatifs au régime autonome CJ. En effet, un régime de sur-détonation ($D > D_{CJ}$), va engendrer des cellules plus petites [58].

Le rapport entre la longueur d'une cellule et sa largeur varie généralement en $L/\lambda \sim 1.5 - 2$. L'angle formé par la trajectoire des points triples après leur collision avoisine les 30° . Cette valeur change peu avec la taille des cellules. Cependant, la régularité des cellules

peut significativement être impactée par les conditions initiales, ce qui les rend parfois difficile à mesurer. De ce fait, une classification a été proposée par Strehlow [52] et par la suite Libouton et al. [59] pour décrire les structures cellulaires. Les auteurs les ont classé en quatre types en fonction du degré de la régularité, comme l'atteste la Figure 1.11.

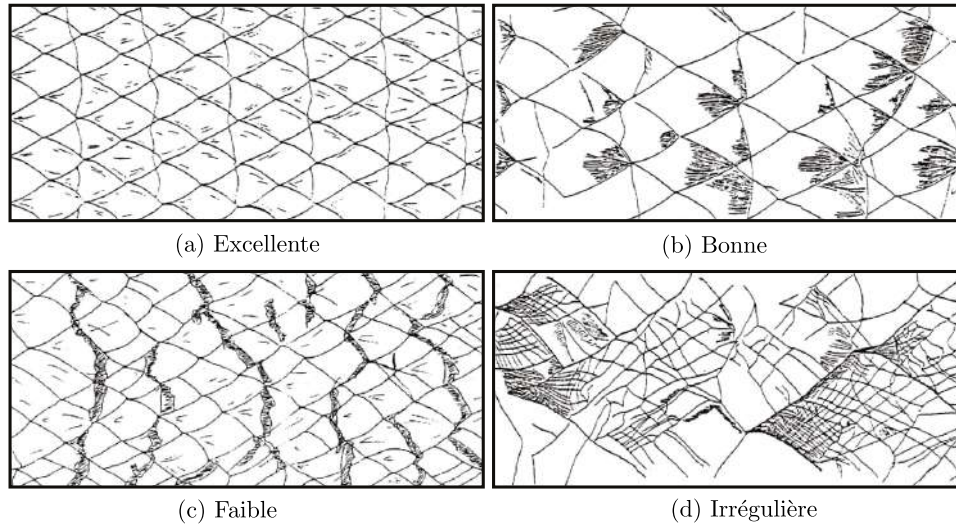


FIGURE 1.11 – Classification des structures cellulaires suivant leur régularité tel que proposé par Libouton et al. [59].

- (a) Des structures d'excellente régularité. Toutes les cellules peuvent être confondues. Ces structures sont rencontrées dans les détonation fortement diluées avec des gaz mono-atomiques tels que l'argon et l'hélium. Les mélanges réactifs associés sont généralement des carburants légers (H_2 , C_2H_2 ...) réagissant avec le dioxygène.
- (b) Des structures de bonne régularité. Elles sont rencontrées généralement dans des mélanges à faible dilution et haute pression. La taille des cellules est relativement uniforme et peut être mesurée avec une précision assez raisonnable.
- (c) Des structures de faible régularité. Ces structures montrent une dispersion assez importante dans les tailles de cellules, ce qui engendre des erreurs significatives dans la mesure de la taille moyenne.
- (d) Des structures irrégulières. Elles sont généralement la signature d'un combustible lourd réagissant avec O_2 ou le CH_4 réagissant avec de l'air.

La régularité des cellules peut être liée aux propriétés des ondes transverses. En effet, pour une détonation stable, les ondes transverses sont très faibles. Tandis que, dans les mélanges instables, les ondes transverses sont fortes et dans certaines conditions, elles deviennent des détonations transverses [60-62]. Cette régularité peut-être liée à l'énergie d'activation réduite d'un mélange [63]. Les détonations avec de faibles énergies d'activation ont tendance à avoir des structures cellulaires plus régulières tandis que pour de grandes énergies d'activations, les structures cellulaires observées sont plutôt irrégulières.

La Figure 1.12 montre un exemple d'une vue frontale d'une détonation multicellulaire dans le cas d'un tube cylindrique (gauche) et d'une section carrée (droite). Les photographies ont été obtenues en plaçant un mylar dont la face extérieure a été aluminisée. Elles ont été prises au moment où le front de détonation a déformé le mylar. On peut constater de très nombreuses structures. Dans le tube circulaire, lorsque le front de détonation

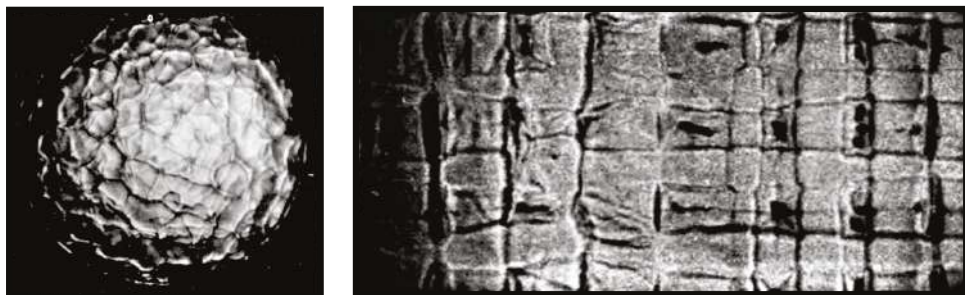


FIGURE 1.12 – Photographie de l'empreinte du front de détonation. Gauche : section circulaire de diamètre de 52 mm, mélange $C_2H_2 + 2.5 O_2 + 10.5 Ar$, à pression 20 kPa [64] ; Droite : section rectangulaire $47.5 \times 22 \text{ mm}^2$, mélange $C_2H_4 + 3 O_2 + 10 Ar$, à pression 20 kPa [58].

connaît une décroissance importante dans le nombre de points/lignes triples, la détonation devient hélicoïdale. Pour tous les mélanges réactifs, la trajectoire du point triple est hélicoïdale avec un pas constant imposé par le diamètre du tube. Ce régime est considéré comme étant à la limite de propagation stable. De nombreuses études expérimentales [65-67] ainsi que numériques [68, 69] font état de ces observations.

Pour un tube à section rectangulaire, le couplage entre la détonation et la géométrie est plus complexe. Les ondes transverses qui se propagent sur le front peuvent adopter trois modes qualifiés de rectangulaires, diagonale et hélicoïdale. Ces modes feront l'objet d'une étude approfondie par la suite.

1.4.1 Prédiction de la taille des cellules

Une relation entre la taille de cellule λ et la longueur d'induction l_{ind} obtenue par le modèle ZND a fait l'objet de nombreuses études paramétriques.

Shchelkin et Troshin [70, 71] ont été les premiers à relier ces deux grandeurs par une constante de proportionnalité $\lambda = A \cdot l_{ind}$, A étant une constante empirique, variant de 10 à 100. Elles reproduisent assez bien les résultats expérimentaux, au voisinage de la stœchiométrie. Afin d'étendre la validation de cette relation, Gavrikov et al. [72] ont proposé de faire dépendre le facteur A de l'énergie d'activation réduite E_a/RT_0 . De même,

Ng et al. [73] ont proposé de corrélérer ces deux échelles spatiales à l'aide du paramètre de stabilité χ , qui permet de prendre en compte le rapport des longueurs d'induction et de réaction :

$$\lambda = A(\chi)l_{\text{ind}} = \sum_{k=0}^N (a_k \chi^{-k} + b_k \chi^k) l_{\text{ind}} \quad (1.24)$$

où a_k, b_k, k ont été calibrés sur un ensemble important de pré-mélanges et de conditions initiales [73]. Une base de données de taille de cellule λ pour un éventail important de mélanges et de conditions initiales a été mis en ligne par Kaneshige et Shepherd [74].

Une détonation est considérée comme multicellulaire quand la taille de la section à travers laquelle le front de détonation se propage contient plusieurs cellules. Les dimensions transversales caractéristiques de la section (diamètre du tube ou largeur du canal) sont plus grandes que λ . Lorsque le mélange est suffisamment dilué ou la pression initiale est diminuée, la taille de la cellule augmente jusqu'à s'approcher des dimensions caractéristiques de la section de passage. Un couplage acoustique entre la structure de la détonation et les conditions aux limites (i.e. confinement du tube ou du canal) s'effectue. La détonation s'adapte alors à la géométrie de la section de passage et devient une détonation marginale [75].

1.5 Épaisseur hydrodynamique

La description laminaire de la détonation idéale montre que la fin de la réaction chimique s'effectue au niveau du plan sonique. Au-delà, la détonation est immune de toute perturbation provenant de l'aval. En revanche, pour une détonation multidimensionnelle et instationnaire, la position de ce plan est fortement perturbée par les fluctuations présentes dans la zone réactive. En effet, la présence des poches de gaz imbrûlés, les instabilités de type Kelvin-Helmholtz et Richtmyer-Meshkov et les jets formés en aval des points triples et des ondes transverses ont tendance à retarder l'arrivée du plan sonique. La prise en compte de ces effets dans la description de la détonation nécessite d'introduire un nouveau paramètre dynamique nommé l'épaisseur hydrodynamique. Elle correspond à la distance entre la position moyenne du choc incident et du plan sonique. Cette notion, introduite pour la première fois par Soloukhin [76, 77] a fait l'objet de plusieurs études expérimentales. Les premières tentatives de mesure de cette épaisseur ont été réalisées par Vasil'ev et al. [78, 79] en plaçant un obstacle pointu dans l'écoulement. Lorsque le front de détonation rentre en contact avec l'obstacle, un choc détaché se forme et se maintient tant que la vitesse locale de l'écoulement reste supersonique. La transition entre le choc détaché vers un choc attaché à l'obstacle et à une onde de choc qui se propage

dans l'écoulement montre le passage d'un régime supersonique au régime subsonique. Cette transition marque alors la présence du plan sonique, ce qui permet de déterminer l'épaisseur hydrodynamique. Les auteurs ont situé ainsi le plan sonique à $2-4 \lambda$ du choc. Afin de récupérer une position moyenne du plan sonique, Weber et Olivier [80] ont proposé une estimation du plan sonique en utilisant un peigne composé de multiples obstacles pointus, ce qui a conduit à une estimation de l'ordre de $0.4-0.8\lambda$. Cependant, ces mesures sont effectuées dans le repère du laboratoire et non dans celui associé au front. Une autre méthode développée par Edwards et al. [81] est basée sur l'analyse des signaux de pression. La méthode suppose qu'au passage du plan sonique, les fluctuations de pression vont s'atténuer. Les auteurs ont obtenu une épaisseur de $2-4 \lambda$. De part son aspect pratique, cette dernière méthode est souvent la plus utilisée dans les études expérimentales [82].

Sur le plan des simulations numériques, une méthode a été proposée pour estimer l'épaisseur hydrodynamique à travers les moyennes de Favre par Lee et Radulescu [83]. Des profils moyens 1-D de pression, de masse volumique et de vitesse matérielle peuvent être obtenus et permettent de déterminer le nombre de Mach moyen et ainsi la position du plan sonique. La méthode a été étendue par la suite pour des études de propagation de détonations avec pertes par Sow et al. [84] dans le cas 1-D puis étendue au cas 2-D par Reynaud et al. [85] finalement dans le cas des sprays par Watanabe et al. [86].

1.6 Amorçage des détonations

Une détonation peut être amorcée de deux manières différentes. La première, dite amorçage direct consiste en une formation spontanée d'une détonation causée par une source d'énergie suffisamment intense déposée dans un mélange réactif. Si l'énergie déposée est suffisante, une onde de choc sphérique est générée. Cette onde divergente décroît jusqu'à atteindre les conditions CJ et continue à se propager d'une façon autosimilaire et auto-entretenu. En revanche, si l'énergie déposée n'est pas suffisante, l'onde de choc et la zone de réaction se découplent empêchant ainsi la formation de détonation. Le régime critique se caractérise par un découplage local du choc et de la zone de réaction, avant que l'onde de détonation ne se propage de façon autonome. Eckert [87] a montré que l'énergie critique pour l'amorçage d'une direct se mettait sous la forme $E_c \propto \tau_{\text{ind}}^3$.

La seconde manière est la transition d'une déflagration à la détonation (DDT). Elle est souvent représentée par l'accélération d'une flamme turbulente vers des conditions de détonation [88]. Il existe plusieurs effets dynamiques impliqués dans la DDT recensés dans la littérature. Les premières observations par Oppenheim et al. [88] sur des études

expérimentales de propagation de flamme dans des tubes ont mis en lumière l'existence d'explosions localisées en aval du choc précurseur, au sein de la couche limite près des parois et au niveau du front de flamme. Ces observations ont été reproduites par la suite à l'aide de simulations numériques [89-91]. Les résultats ont montré que le mécanisme clé dans la transition est bien le gradient de température (gradient de délai d'auto-inflammation). Un autre mécanisme de DDT a été identifié par Deshaies et Joulin [92], [93-95]. Des interactions entre le front de flamme et les effets compressibles des gaz brûlés comme frais (ou par un choc de faible amplitude) peuvent entraîner une accélération du front, due à l'extrême sensibilité de la vitesse du front aux fluctuations de température et à l'augmentation de la surface de flamme.

1.7 Influence des conditions aux limites

Dans la plupart des configurations, les détonations se propagent dans un espace physique contraint. Ces conditions aux limites jouent le rôle d'un confinement et l'interaction entre cet environnement et la zone contenue dans l'épaisseur hydrodynamique influe directement sur la dynamique de propagation. En effet, des pertes peuvent être générées à ce niveau occasionnant un déficit de vitesse qui peut atteindre jusqu'à 20-30% la vitesse théorique de Chapman-Jouguet CJ, voire une extinction. Dans certaines conditions tels que les accidents industriels, une extinction rapide de la détonation est souhaitée [96]. En revanche, dans les applications liées à la propulsion tels que les moteurs à détonation rotative (RDE) se basant sur une propagation continue et stationnaire de la détonation, l'extinction de la détonation est indésirable [97, 98]. La compréhension des mécanismes relatifs à la propagation et à l'extinction des détonations lors de l'interaction avec différentes conditions aux limites est importante pour la prévention des accidents industriels et le bon fonctionnement de ces moteurs. Il existe deux catégories de conditions aux limites étudiées dans la littérature expérimentale : les confinements rigides et les confinements "souples". Nous allons à travers cette section revoir d'une manière non-exhaustive ces différentes conditions ainsi que leur apport dans la compréhension de la phénoménologie de la détonation d'une manière générale. Une revue plus complète traitant ce sujet est à retrouver dans Lee [15] et la thèse de Reynaud [99].

1.7.1 Détonations dans des confinements rigides

Les premières observations du déficit de vitesse ont été faites sur des tubes dont la dimension caractéristique (i.e. diamètre d) est du même ordre de grandeur que la longueur caractéristique de la détonation (i.e. taille de cellule λ). La vitesse de détonation décroît d'une manière linéaire avec le diamètre du tube [100, 101] quelque soit le mélange ou sa richesse [102] jusqu'à atteindre une valeur critique d_c en dessous de laquelle aucune propagation n'est possible. Une corrélation entre ce diamètre et la taille de cellule a été établie par Fay [103], donnant $d_c = \lambda/\pi$. Proche de cette limite, la détonation épouse un mode de propagation dit galopant [65], avec des fluctuations importantes de la vitesse du front [104], occasionnées par une succession d'extinctions et de réamorçages locaux [105]. Les pertes associées à ces extinctions ont été modélisées pour la première fois par Zel'dovich [106]. L'auteur a proposé un modèle monodimensionnel dans lequel des termes liés au frottement pariétal et aux pertes thermiques étaient modélisés sous forme de termes sources/puits dans les équations d'Euler. Par la suite, Fay [107] proposa une amélioration de ce modèle pour prendre en compte des effets liés au développement de la couche limite par une représentation bidimensionnelle. L'observation des lignes de courant sur les parois montre une divergence de celle-ci lorsque les particules sont observées dans le repère du choc. Cette accélération a tendance à générer des pertes liées à l'expansion relative des produits et une courbure du front. Des comparaisons entre les déficits de vitesse théoriques prédits par ce modèle et des expériences ont été réalisées pour des mélanges à différentes sensibilités [108]. Les mélanges stables semblent être bien prédits par le modèle tandis que des écarts importants sont observés pour des mélanges instables.

Dans l'optique d'appréhender le mécanisme responsable de ces écarts, des études ont été menées avec des confinements avec des parois poreuses. L'utilisation de tubes poreux permet d'amortir les ondes transverses au niveau des parois, ce qui engendre une augmentation artificielle des pertes [109-111]. Une importante étude paramétrique menée par Radulescu et Lee [38, 112] a mis en lumière l'existence d'une différence majeure entre le mécanisme d'extinction d'une détonation stable et une détonation instable. Les auteurs ont observés, les limites de propagation de plusieurs mélanges. En faisant varier le rapport entre l'épaisseur du canal et la taille de cellule h/λ , la hauteur critique de propagation observée dépend explicitement de la stabilité du mélange. Les détonations stables semblent être les moins résistantes avec une hauteur critique $h_c/\lambda = 11$ contre une hauteur nettement inférieure pour un mélange instable $h_c/\lambda = 4$. En outre, le processus d'extinction est différent. Pour un mélange stable, l'extinction est causée par des pertes de débit-masse aux parois. En revanche, c'est l'atténuation des ondes transverses et l'absorption des points triples qui provoquent l'extinction dans le cas d'un mélange instable. Ces résultats

expérimentaux ont été comparés avec un modèle monodimensionnel incorporant des pertes, basé sur les travaux de Fay. Les déficits de vitesse des mélanges stables ont été correctement reproduits, tandis qu'un écart d'un ordre de grandeur a été obtenu pour un mélange instable. Cette différence tient son origine du mécanisme par lequel les deux mélanges se propagent. Pour un mélange stable, l'auto-inflammation des gaz par le choc incident semble suffire à l'entretien de la propagation. Pour un mélange instable, ce sont les ondes transverses et les fluctuations hydrodynamiques associés qui assurent la propagation. Sachant que les modèles théoriques ont une description purement laminaire de l'écoulement, les effets liés aux ondes transverses ne sont pas pris en compte.

Des simulation numériques bidimensionnelles reposant sur les équations d'Euler et une cinétique chimique à une étape globale ont été réalisées par Mazaheri [113] afin de reproduire ces résultats expérimentaux. Malgré, une description de l'écoulement qualitativement fidèle entre les résultats numériques et les expériences, les limites de propagations vont à l'encontre des résultats expérimentaux. En effet, le mélange stable offre une plus grande résistance aux pertes que les mélanges instables. Les auteurs ont attribué ce paradoxe aux effets turbulents non pris en compte dans les équations d'Euler. Une modélisation de la diffusion permettra de mieux consommer les gaz imbrûlés, ce qui est nécessaire à la propagation des détonations très instables.

À ce jour, et bien que les observations expérimentales ont été reconfirmées par Wang [114], la source de ces écarts entre les expériences, les modèles et les simulations numériques reste non résolue.

1.7.2 Détonations confinées par un gaz inerte

Lors du passage de la détonation, le rapport des pressions s'élève jusqu'à 20 à 30. Les contraintes engendrées sur le milieu environnant sont suffisamment élevées et peuvent mener à la rupture de l'intégrité du confinement (mylar, tube en PVC). Cette nouvelle surface libre va profondément modifier les propriétés de la propagation de la détonation. Une configuration importante est celle d'une détonation se propageant dans un milieu confiné d'une part, par un confinement léger tels que des gaz inertes et d'autre part, par un confinement rigide, tel qu'une paroi. Cette configuration est rencontrée dans les moteurs à détonation rotative où la détonation est confinée par des gaz brûlés provenant d'un cycle précédent, comme l'atteste la Figure 1.13. Cette configuration est également observée, à la suite de la fuite d'un combustible d'un réservoir. Dans le contexte de la sécurité des procédés industriels, le gaz inerte est l'air aux conditions atmosphériques. Les premières études réalisées sur des détonations confinées par des gaz inertes remonte

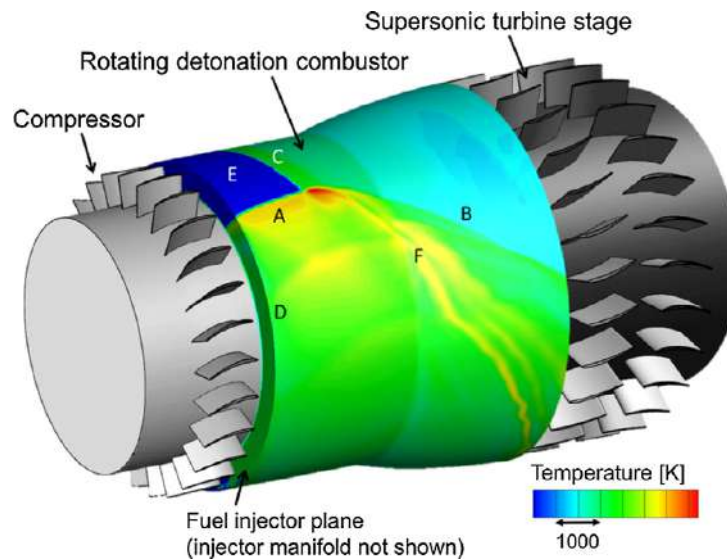


FIGURE 1.13 – Simulation numérique d'une chambre à combustion d'un moteur à détonation rotative. Le front de détonation **A** se propage dans un milieu **E** confiné d'un côté par le fond de la chambre et de l'autre par des gaz brûlés **C**. Figure adaptée de Sousa et al. [115].

à la deuxième moitié du 19^{ème} siècle [116, 117]. Les auteurs ont proposé un analogue aux détonation d'explosif condensés en cartouche cylindrique. Une première approche fut l'utilisation de jets laminaires de pré-mélanges H_2-O_2 émergeant dans l'air ambiant. Une fois que la détonation initiée à sa base, des images strioscopiques ont permis d'observer le succès ou l'échec de la propagation de la détonation. Les tentatives de propager une détonation dans la zone complètement confinée par l'air se sont toutes soldées par un échec. Les auteurs ont observé que lorsque la détonation émerge dans cette zone, des fortes expansions provoquent un découplage entre le choc incident et la zone de réaction.

Afin de surmonter cette difficulté, les auteurs ont proposé une configuration plus simplifiée où les expansions sont moins importantes. Elle consiste en un tube à section carrée dont l'une des parois est remplacée par un film plastique. Ce mylar de $10\ \mu m$ d'épaisseur permet une séparation entre le mélange réactif et l'air ambiant. Les essais étaient satisfaisants et la détonation a réussi à se propager. Les strioscopiques ont montré pour la première fois la possibilité de propagation d'une détonation confinée par un gaz inerte. Elles montrent un front de détonation courbe avec un choc oblique transmis dans le milieu inerte. Une interface séparait le mélange inerte avec les produits de combustion comme l'atteste la Figure 1.14. Le succès et l'échec de la détonation dans les deux cas ont été attribués à deux facteurs. En premier lieu, les expansions latérales et la courbure globale du front sont beaucoup plus grandes dans le cas d'une colonne de gaz. En outre, la présence de parois rigides dans le cas d'une section carrée permet aux points triples de s'y réfléchir, facteur qui peut dans une certaine mesure compenser les pertes.

Par la suite, l'influence du confinement léger a été étudié en changeant l'air par un gaz plus léger à savoir l'hélium. Les auteurs ont constaté un changement de topologie et que le choc oblique transmis à la frontière devenait un choc détaché qui se propage en amont de la détonation. D'après Sommers [116], le paramètre principal caractérisant l'influence du confinement est le rapport des impédances acoustiques entre les milieux inerte et réactif. À ce stade, la présence d'un film épais séparant les deux milieux servait de confinement

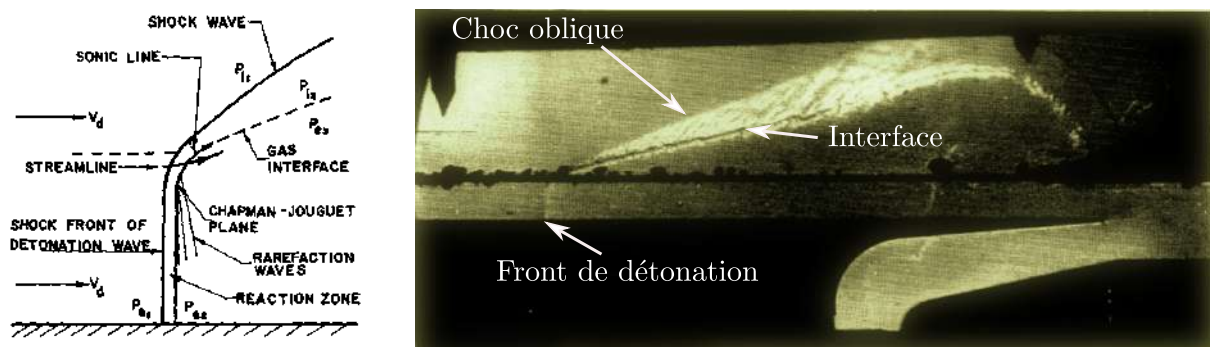


FIGURE 1.14 – Gauche : schéma représentant la structure de propagation de la détonation dans un milieu semi-confiné par un gaz inerte, adapté de [117]. Droite : représentation strioscopique de la propagation de la détonation dans un mélange $H_2 - O_2$ à la stœchiométrie confinée par N_2 [118].

supplémentaire non souhaité. La réflexion des points triples au niveau du front permettait de soutenir la détonation et de diminuer le déficit de vitesse. L'enjeu est alors de choisir un film suffisamment épais pour limiter la diffusion moléculaire entre les deux milieux mais aussi suffisamment fin pour éviter tout confinement. Dabora et al. [118, 119] ont proposé alors à travers une analyse théorique une formule permettant d'estimer l'épaisseur maximale nécessaire d'un film pour satisfaire les conditions précédentes basées sur le rapport de densité entre le film et le mélange réactif : $l_f/l_{1/2} = 0.1\rho_0/\rho_f$. L'utilisation d'un film en nitrocellulose d'épaisseur de 25 nm a permis à l'auteur d'étudier la dynamique de propagation du front de détonation pour un mélange $H_2 - O_2$ comme l'atteste la Figure 1.14 (droite). Les limites de propagation ont aussi fait l'objet d'une étude approfondie en faisant varier la hauteur de la section du tube h . Cette étude a mené à trois conclusions. Premièrement, le déficit de vitesse observé est linéairement proportionnel à la longueur de la réaction chimique et à l'inverse de la hauteur réactive. La structure de la détonation et sa vitesse est fortement dépendante de l'impédance acoustique ρc entre les deux milieux. Ensuite, la détonation adopte un comportement oscillatoire aux voisinages des limites de propagation. Finalement, la hauteur critique de propagation est atteinte à $h_c/\lambda = 3$. Pour un confinement "lourd" composé du diazote N_2 , la vitesse critique est atteinte à 90% de la célérité CJ. Pour des confinements plus légers, les vitesses observées sont autour de 60-70% D_{CJ} pour l'hydrogène et 50-60% D_{CJ} pour l'hélium. Cependant, les auteurs questionnent ces derniers résultats en suspectant le fait que la détonation n'ait pas eu le temps de

devenir stationnaire. En effet, les auteurs pensent qu'en attendant plus longtemps (au-delà de la longueur de leur tube d'étude), ces détonations vont observer un découplage puis s'éteindre.

Adams et al. [120, 121] se sont intéressés de plus près au couplage de la détonation avec le choc inerte à travers la variation de l'impédance acoustique entre les deux milieux. Les auteurs ont confirmé les observations de Dabora à travers des images strioscopiques. La Figure 1.15 illustre les deux configurations de propagation du front de détonation d'un mélange 50% $H_2 + 50\%$ O_2 confiné par deux gaz inertes, l'hélium (gauche) et l'hydrogène (droite). Dans cette expérience, le gaz inerte est séparé à son tour par un film en nitrocellulose avec l'air ambiant. Pour le confinement par hélium, on assiste à une transmission d'un choc oblique dans le gaz inerte, tandis que pour le confinement plus léger, le choc oblique devient un choc détaché avec un angle de courbure inversé. L'auteur suggère que quand le choc est détaché du front, le gaz inerte avec lequel la détonation interagit devient pré-choqué et voit donc son impédance acoustique augmentée, ce qui entraîne le redressement du front. Ainsi, le découplage choc-déflagration est repoussé, de même pour l'extinction. La vitesse minimale de propagation enregistrée était de $83\% D_{CJ}$.

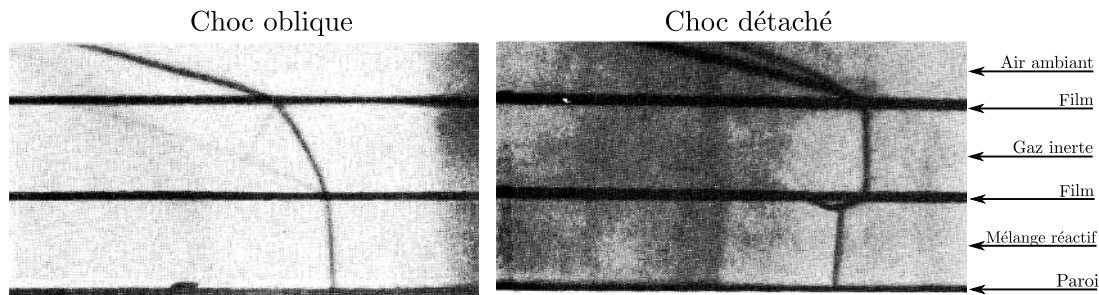


FIGURE 1.15 – Visualisation du front de structure de la détonation pour un mélange 50% $H_2 + 50\%$ O_2 confiné par He (gauche) et H_2 (droite). Adapté de Adams et al. [120].

L'influence de l'épaisseur du film séparant le gaz réactif et le gaz inerte a été revisitée par Vasil'ev [122]. En effet, l'auteur stipule que la structure cellulaire interagit avec le film quelle que soit son épaisseur. Les points triples réfléchis contribuent à la propagation de la détonation à une épaisseur beaucoup plus faible qu'elle ne le devrait. Afin de s'affranchir de cette problématique, Vasil'ev [122] revient à la configuration imaginée par Sommers [116]. Un film sépare initialement le pré-mélange réactif du gaz inerte, puis est rompu avant la mise à feu. En outre, Vasil'ev établit un parallèle entre cette configuration et l'émergence de détonation dans des demi-espaces libres [54, 55, 123] et a également proposé une analogie de l'amorçage de la détonation par une charge cylindrique [124]. L'auteur a constaté que la vitesse de l'onde explosive diminue avec la distance par rapport à la source d'amorçage, atteint un minimum à une certaine distance, puis augmente jusqu'à une détonation auto-entretenue. Deux rayons sont donc considérés, pour les étapes initiales d'initiation jusqu'à

R_1 et l'accélération vers CJ à R_2 . L'auteur a supposé que le rayon critique du mélange gazeux de la colonne se situe entre ces deux rayons. Le diamètre critique de la détonation étant important, le dispositif expérimental n'a pas permis une prédiction concluante. Vasil'ev et Zak [125] ont poursuivi l'étude en proposant des améliorations au dispositif expérimental qui générerait de la turbulence entre les milieux réactif et inerte. Un flux concentrique utilisant un piston à eau générant un tau identique de gaz réactif et de gaz inerte réduit la turbulence à l'interface. Le diamètre critique constaté est supérieur à celui de Dabora [119]. Les auteurs attribuent cette différence à la nature de l'interface.

Murray et Lee [126, 127] se sont également intéressés à la transition d'une détonation confinée par des parois rigides à une colonne de pré-mélange réactif confiné par un gaz inerte. Les auteurs ont observé que lors de la transmission entre les deux zones, la détonation subit d'abord des extinctions locales proches de la frontière, puis un réamorçage et finalement une propagation stationnaire. En outre, des noyaux de réamorçage locaux s'opèrent au niveau de l'interface entre les deux milieux permettent de soutenir la détonation. Les auteurs ont aussi observé que, si les expansions venant de l'interface arrivent à atteindre le centre du tube avant une distance de deux fois le diamètre, la détonation ne pourra plus être entretenue.

Cette configuration a eu un regain d'intérêt durant cette dernière décennie avec la prévention des accidents industriels [128-131]. Une base de donnée expérimentale a été mise en place, inspirée de la configuration de Dabora [118]. Pour les mélange réactifs à base d'hydrogène, les hauteurs critiques obtenues sont en adéquation avec les résultats de Dabora ($h_c/\lambda \sim 3$).

1.8 Synthèse partielle

Ce chapitre rappelle des généralités fondamentales à la compréhension de la détonation. Les premiers modèles théoriques ainsi que leur limitations sont présentées afin de positionner les différents états et les échelles caractéristiques mises en jeu. Cette modélisation (CJ,ZND) stationnaire décrit la détonation comme un choc fort à l'état vN couplé à une zone de réaction qui se propagent d'une manière auto-entretenu. L'énergie injectée dans la zone de réaction accélère l'écoulement jusqu'à atteindre l'état sonique CJ. La distance entre l'état vN et l'état CJ se nomme l'épaisseur hydrodynamique. Dans la réalité, la détonation est multidimensionnelle et instationnaire. Le front est ainsi composé de chocs incidents, de disques de Mach et d'ondes transverses. L'ensemble est alors relié par un point triple. La trajectoire formé par ce dernier lors de sa propagation forme des structures

en forme de losange appelées structures cellulaires. L'instabilité de la détonation se traduit ainsi par la régularité de ces cellules. Des formes régulières décrivent un mélange stable tandis que les formes irrégulières décrivent un mélange instable. Le processus d'amorçage de la détonation se fait soit par une transition d'une flamme turbulente soit par un amorçage direct par un dépôt local d'une quantité énergétique importante. Trois paramètres de stabilité qui permettent de caractériser la régularité de la structure ont été présentés : l'énergie d'activation réduite, le paramètre χ produit de l'énergie d'activation réduite avec le rapport des temps d'induction et de réaction, et finalement le rapport des capacités calorifiques.

Dans la réalité, la sensibilité de la zone de réaction aux perturbations externes influe sur la propagation des détonations. Les conditions aux limites peuvent ainsi induire une divergence latérale de l'écoulement qui va entraîner un déficit de vitesse. Parmi les différentes configurations existantes, la propagation d'une détonation confinée par un gaz inerte a eu un important regain d'intérêt. Cette configuration est rencontrée dans des applications de propulsion aéronautique et spatiale tel que les moteurs à détonation rotative ou encore dans des applications de sécurité industrielle pour prévenir les explosions catastrophiques.

La difficulté de mise en œuvre d'expériences pouvant fournir des analyses détaillées du comportement de la détonation dans ces cas ainsi que les limitations des diagnostics expérimentaux implique le besoin d'aller vers des simulations numériques fiables et prédictives. Les modèles mathématiques et les hypothèses simplificatrices doivent être étudiées afin de comprendre leur influence sur les échelles caractéristiques et leur limitations lorsqu'il s'agit de reproduire fidèlement le comportement naturel de la détonation.

Équations mathématiques

Sommaire

2.1	Équations de conservation	33
2.2	Thermodynamique	34
2.2.1	Équation d'état des gaz parfaits (GP)	35
2.2.2	Expression de l'énergie et de l'enthalpie - GP	36
2.2.3	Expression de la vitesse du son - GP	37
2.2.4	Équation d'état de Noble-Abel	38
2.3	Réactions et cinétique chimique	39
2.3.1	Réaction chimique globale	39
2.3.2	Mécanismes cinétiques détaillés	40
2.3.3	Mécanisme cinétique à trois étapes	41
2.3.4	Cinétique chimique	42
2.3.5	Expression des taux de réactions pour les schémas réduits	44
2.4	Synthèse partielle	46

2.1 Équations de conservation

Les équations retenues dans le cadre de ce travail sont les équations d'Euler. Historiquement, le mathématicien *Léonard Euler* n'a dérivé que les équations de conservation de masse et de quantité de mouvement en 1753 [132, p. 79]. En effet, les premières bases de la thermodynamique ont été posées par le physicien *Sadi Carnot* au 19^{ème} siècle avec l'arrivée de la notion de conservation d'énergie. Cependant, la littérature dans la dynamique des fluides fait référence à l'ensemble de ces équations de conservation comme étant les équations d'Euler. Mathématiquement, ce système d'équations est hyperbolique non linéaire décrivant un écoulement adiabatique, compressible, tridimensionnel. Les effets liés à la viscosité et la conductivité thermique ne sont pas pris en compte. Les forces

volumiques de pesanteur ainsi que les flux de chaleur radiatifs sont négligés. Enfin, l'écoulement est considéré réactif composé d'une seule phase gazeuse. On adoptera une écriture des équations avec un choix de variables conservatives permettant l'utilisation d'une large classe de méthodes numériques présentées par la suite dans ce manuscrit.

$$\text{Continuité/Masse : } \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (2.1)$$

$$\text{Quantité de mouvement : } \frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j + p \delta_{ij}}{\partial x_i} = 0 \quad (2.2)$$

$$\text{Énergie : } \frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i (E + p/\rho)}{\partial x_i} = 0 \quad (2.3)$$

$$\text{Conservation des espèces : } \frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i Y_k}{\partial x_i} = \rho \dot{\omega}_k \quad (2.4)$$

Les équations (2.1) à (2.4) représentent respectivement : l'équation de conservation de la masse, l'équation de conservation de la quantité de mouvement résultante de l'application de la deuxième loi de *Newteon*, l'équation d'énergie totale obtenue par application du premier principe de la thermodynamique, composée de l'énergie cinétique et interne. L'énergie interne est obtenue par la contribution de l'énergie sensible et chimique. Enfin, l'équation de conservation des espèces chimiques qui traduit l'évolution des espèces (disparition et apparition) subissant des réactions chimiques au sein du volume de contrôle étudié.

Les indices i et j varient de 1 jusqu'à 3 et représentent les trois dimensions de l'espace physique. L'indice k varie de 1 à N où N est le nombre d'espèces chimiques mises en jeu dans le système. La somme des équations de conservation des espèces (2.4) permet de retrouver l'équation de continuité (2.1) à travers la propriété $\sum_{k=1}^N Y_k = 1$. Pour des raisons pratiques, $N - 1$ équations sont résolues numériquement. La dernière espèce est ainsi déduite de la propriété précédente $Y_N = 1 - \sum_{k=1}^{N-1} Y_k$. Ceci offre un avantage en terme de quantité de données transportées lors des calculs et réduit les erreurs numériques liées à la conservation de la masse.

2.2 Thermodynamique

Nous allons rappeler dans cette section quelques principes fondamentaux de la thermodynamique utilisés dans la suite de l'étude. Le milieu étudié est considéré continu et localement à l'équilibre thermodynamique. Ainsi, le fluide est de taille macroscopique de sorte à assurer l'homogénéité de la densité moléculaire et l'isotropie de l'espace des vitesses. Les grandeurs macroscopiques sont liées aux grandeurs microscopiques à travers la pression, la température et l'énergie interne. La pression est donc par définition, la valeur

moyenne par unité de surface de la force exercée lors des chocs entre les molécules. La température est l'expression de l'agitation moléculaire. L'énergie interne n'est que la somme des énergies cinétiques microscopiques de translation, de rotation et de vibration. Dans le cas d'un milieu hors équilibre (e.g. effet Sunyaev-Zel'dovich en cosmologie [133]...), la définition de la température devient complexe et une définition de plusieurs températures (de vibration, rotation...) s'impose.

Dans un volume donné, le mélange gazeux constitué de N espèces chimiques est caractérisé par sa masse m et un nombre de moles total n . La masse molaire d'un mélange est alors définie par $\bar{W} = m/n$. De même, chaque espèce chimique est caractérisée par une masse $m_k = n_k W_k$, W_k étant la masse molaire de l'espèce k . Les fractions massiques sont alors définies par

$$Y_k = m_k/m \quad (2.5)$$

La masse molaire \bar{W} peut alors s'exprimer de la façon suivante :

$$\bar{W} = \sum_{k=1}^N X_k W_k \quad (2.6)$$

$X_k = n_k/n$ est la fraction molaire de l'espèce chimique k . Les relations suivantes peuvent être obtenues :

$$\bar{W} = \left(\sum_{k=1}^N \frac{Y_k}{W_k} \right) \quad (2.7)$$

et

$$X_k = \rho \frac{Y_k}{W_k} \quad (2.8)$$

en tenant compte que $\sum_{k=1}^N Y_k = \sum_{k=1}^N X_k = 1$.

2.2.1 Équation d'état des gaz parfaits (GP)

Pour une espèce k , la loi d'état des gaz parfaits s'exprime $p_k V = n_k R_u T$, où V est le volume total occupé par le mélange et R_u est la constante universelle des gaz parfaits. De la loi de Dalton, $p = \sum_{k=1}^N X_k p_k$, on obtient l'équation d'état des gaz parfaits pour le mélange

$$p = \sum_{k=1}^N X_k p_k \quad (2.9)$$

$$p = \sum_{k=1}^N \frac{\rho_k}{W_k} R_u T \quad (2.10)$$

et finalement

$$p = \rho RT \quad \text{avec} \quad R = \frac{R_u}{W}. \quad (2.11)$$

2.2.2 Expression de l'énergie et de l'enthalpie - GP

L'énergie interne est définie comme la somme des énergies cinétiques microscopiques correspondant à l'agitation thermique et des énergies d'interaction microscopiques correspondant aux énergies de liaisons et d'interactions moléculaires. Par définition, l'agitation thermique est une fonction dépendante de la température et les énergies d'interaction intermoléculaires restent constantes dans le cas d'un gaz parfait. Il s'ensuit alors que l'énergie interne ne dépend que de la température. Il vient alors

$$de = \left(\frac{\partial e}{\partial T} \right) dT \quad (2.12)$$

Ces considérations valent aussi pour l'enthalpie

$$dh = \left(\frac{\partial h}{\partial T} \right) dT \quad (2.13)$$

La capacité thermique est la quantité d'énergie nécessaire par unité de masse pour élever d'un degré la température d'une substance. La capacité thermique massique à volume constant est c_v et c_p est la capacité thermique massique à pression constante. Elles sont définies par les relations suivantes :

$$c_v = \left(\frac{\partial e}{\partial T} \right)_v \quad ; \quad c_p = \left(\frac{\partial h}{\partial T} \right)_p \quad (2.14)$$

Pour un gaz parfait, on introduit le coefficient γ , défini par le rapport entre les capacités thermiques à pression constante et à volume constant $\gamma = c_p/c_v$, fonction dépendante uniquement de la température. En s'appuyant sur la relation de Mayer $c_p - c_v = R$, on peut réécrire les expressions des capacités thermiques en fonction de γ :

$$c_v = \frac{R}{\gamma - 1} \quad ; \quad c_p = \frac{\gamma R}{\gamma - 1} \quad (2.15)$$

Dans le cadre d'un mélange idéal, la capacité calorifique est calculée à partir des grandeurs partielles liées aux espèces pondérées par la fraction massique de l'espèce dans le mélange.

L'expression sous sa forme massique est :

$$c_v = \sum_{k=1}^N Y_k c_{v,k} \quad ; \quad c_p = \sum_{k=1}^N Y_k c_{p,k} \quad (2.16)$$

En pratique, ces coefficients sont calculés à partir des tables de JANAF et se présentent sous forme polynomiale en fonction de la température [134]. En intégrant par rapport à la température, les équations de l'enthalpie et de l'énergie interne 2.12 et 2.13 deviennent :

$$e = \sum_{k=1}^N Y_k h_k^0 + \underbrace{\int_{T_0}^T c_v dT - RT_0}_{e_s} \quad ; \quad h = \sum_{k=1}^N Y_k h_k^0 + \int_{T_0}^T c_p dT \quad (2.17)$$

Le premier terme de l'expression d'énergie interne est dit enthalpie de formation tandis que les deux termes restant (e_s) étant l'énergie sensible. On définit l'énergie totale spécifique comme la somme des contributions cinétiques et internes (de formation et sensible).

$$E = e + \frac{1}{2} u_i u_i \quad (2.18)$$

avec la relation entre l'énergie interne et l'enthalpie total $e = h - p/\rho$.

2.2.3 Expression de la vitesse du son - GP

La vitesse du son locale pour un mélange à un état thermodynamique (i.e. équilibre local, fraction massique constantes) donné peut être obtenue à travers la relation de Gibbs-Duhem (sous sa forme différentielle).

$$T ds = de + pd(1/\rho) \quad (2.19)$$

Dans le cas d'un écoulement subissant des transformations isentropique et après quelques transformations et différentiation de l'énergie interne par rapport à la masse volumique et la pression, la relation précédente permet d'écrire

$$\left(\frac{\partial e}{\partial p} \right)_{\rho, Y_k} dp + \left(\frac{\partial e}{\partial \rho} \right)_{p, Y_k} d\rho - \left(\frac{p}{\rho^2} \right) d\rho = 0 \quad (2.20)$$

La vitesse du son exprimée par la variation locale de la pression et la masse volumique s'obtient à travers l'équation précédente

$$c^2 = \left(\frac{dp}{d\rho} \right)_s = \left[\left(\frac{p}{\rho^2} \right) - \left(\frac{\partial e}{\partial \rho} \right)_{p, Y_k} \right] \left(\frac{\partial e}{\partial p} \right)_{\rho, Y_k}^{-1} \quad (2.21)$$

s'écrit aussi sous la forme

$$c^2 = \left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_{T, Y_k} + \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_{\rho, Y_k} \cdot \left[\left(\frac{p}{\rho^2} \right) - \left(\frac{\partial e}{\partial \rho} \right)_{T, Y_k} \right] \left(\frac{\partial e}{\partial T} \right)_{\rho, Y_k}^{-1} \quad (2.22)$$

Pour un gaz parfait :

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

Il vient alors

$$c = \sqrt{\gamma RT} = \sqrt{\gamma p / \rho} \quad (2.23)$$

2.2.4 Équation d'état de Noble-Abel

A haute pression, la loi d'état des gaz parfaits atteint sa limite de validité. En effet, la distance intermoléculaire devient plus petite et les interactions entre les molécules sont par conséquent trop importantes pour qu'elles soient négligées dans la description physique du gaz. L'équation d'état de van der Waals propose une amélioration en tenant en compte le volume des molécules et leurs interactions. Elle s'écrit sous une forme améliorée de l'équation d'état des gaz parfaits.

$$(p - a/v^2)(v - b) = RT \quad (2.24)$$

On remarque qu'une correction est effectuée sur la pression et le volume à l'aide de deux coefficients où a est la constante de cohésion qui tient compte des interactions intermoléculaires et b le covolume occupé par les molécules considérées comme des sphères impénétrables d'un rayon de l'ordre de quelques nanomètres. Dans le cas de la détonation, les températures atteintes par le gaz sont suffisamment élevées pour que l'énergie d'interaction intermoléculaire soit petite devant celle de l'énergie cinétique des molécules. Par conséquent, le coefficient de correction sur la pression peut être négligé sans pour autant perdre de précision dans l'équation de van der Waals. Il en résulte alors, l'équation d'état

de Noble-Abel

$$p(v - b) = RT \quad (2.25)$$

L'énergie interne associée à cette équation d'état se présente sous la forme suivante [135-137]

$$e = \frac{p(v - b)}{\gamma - 1} \quad (2.26)$$

La vitesse du son s'exprime alors en utilisant l'expression 2.21

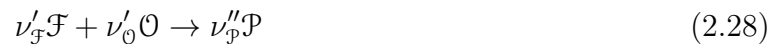
$$c = \frac{\gamma p}{\rho(1 - b\rho)} \quad (2.27)$$

2.3 Réactions et cinétique chimique

Par définition, la combustion est la réaction d'oxydation d'un réactif réducteur (e.g. H_2) par un oxydant (e.g. O_2). Le dégagement de chaleur qui accompagne ces réactions chimiques est un ingrédient inhérent à l'existence et à la propagation des détonations.

2.3.1 Réaction chimique globale

Les réactions globales donnent en utilisant les espèces essentielles une idée du bilan énergétique de la combustion. Ces espèces sont principalement, le combustible \mathcal{F} , l'oxydant \mathcal{O} et les produits \mathcal{P} .



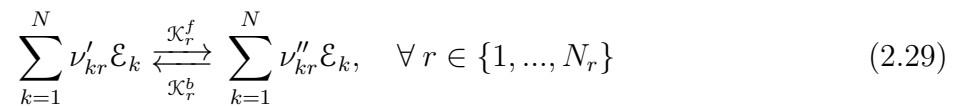
avec $\nu'_{\mathcal{F}}$, $\nu'_{\mathcal{O}}$ et $\nu''_{\mathcal{P}}$ sont respectivement, les coefficients stœchiométriques du combustible, de l'oxydant et du produit. Cette écriture permet une vision de synthèse sur les réactions qui s'opèrent dans un mélange réel. La flèche utilisée dans 2.28 montre que la réaction chimique s'effectue dans un seul sens, celui de \mathcal{F} et \mathcal{O} donnant \mathcal{P} appelé souvent irréversible.

Dans le cadre des détonations, les modèles chimiques à réaction globale sont les plus utilisés dans les simulations numériques multidimensionnelles. Les résultats obtenues ont été qualitativement comparés avec les observations expérimentales pour différents mélanges réactifs. Des mélanges tels que l'acétylène, l'éthylène et l'hydrogène ont été modélisés pour résoudre des problèmes de combustion et de détonation à savoir, les interactions chocs-

flammes [138-140], la transition vers les détonation [141], la formation des structures cellulaires de détonation [60, 72, 90, 113, 142-144] ou encore interaction d'une détonation avec un confinement inerte [85, 145-147]. L'emploi de cette modélisation permet de réduire considérablement le coût de calcul. Néanmoins, elle semble être incapable de reproduire certaines observations expérimentales tels que les doubles structures cellulaires [148-150]. Il convient alors d'utiliser une modélisation chimique avec des schémas détaillés.

2.3.2 Mécanismes cinétiques détaillés

Pour décrire d'une façon formelle une combustion, il faut tenir compte d'un ensemble de réactions intermédiaires faisant intervenir de nombreuses molécules ainsi que des radicaux. Pour un ensemble de réactions chimiques notées N_r , le schéma réactionnel pour chacune des réactions s'écrit sous la forme de Penner comme suit



Avec l'écriture compacte

$$\nu_{kr} = \nu'_{kr} - \nu''_{kr} \quad (2.30)$$

où

- \mathcal{E}_k est l'espèce chimique k dans la réaction r ;
- ν'_{kr}, ν''_{kr} sont les coefficients stoechiométriques des réactifs et des produits, respectivement ;
- $\mathcal{K}_r^f, \mathcal{K}_r^b$ sont les vitesses de réaction r dans le sens directe (*forward*) et inverse (*backward*), respectivement.

Le mécanisme se décompose d'une façon générale en 4 étapes :

- *initiation* : étape d'amorçage de dissociation des réactifs (e.g. : $\text{H}_2 + \text{O}_2 \longrightarrow 2 \text{OH}$ ou $\text{H}_2 + \text{O}_2 \longrightarrow \text{HO}_2 + \text{H}$) ;
- *propagation* : réaction entre les réactifs et les radicaux. Elle est essentiellement à la source de conservation du nombre de radicaux et éventuellement, la formation des produits.
- *ramification* : étape de production de radicaux (e.g. : $\text{H} + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{OH} + \text{O}$). Cette étape produit plus de radicaux qu'elle n'en consomme. Si sa fréquence est élevée, elle permet un emballement global de la vitesse de réaction ;

- *terminaison* : consommation de radicaux et arrivée à l'équilibre chimique (e.g. : $\text{H} + \text{OH} + \text{M} \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O} + \text{M}$).

Le dégagement de chaleur s'effectue essentiellement à travers la réaction de terminaison. La réaction de ramification (ou branchement) est une étape clef dans le mécanisme de combustion. En effet, c'est cette réaction qui produit le radical OH responsable de la consommation du combustible H_2 .

Pour des applications de détonation, les mécanismes cinétiques les plus souvent utilisés pour l'hydrogène sont le Saxena et Williams (San Diego) [151], Hong et al. [152] et Mével et al. [153]. Ce dernier mécanisme a été intensivement validé à travers le calcul de la vitesse de flamme laminaire, les délais d'autoallumage, les limites d'extinction. La sensibilité du schéma à la détonation a été étudié à travers l'estimation des conditions CJ, la capacité à reproduire des structures cellulaires observées expérimentalement et l'amorçage de la détonation. Il offre une bonne estimation des délais d'induction par rapport aux deux autres mécanismes. De ce fait, nos études font appel à ce mécanisme détaillé.

Il est important de souligner que la prise en compte d'un schéma cinétique détaillé conduit à la présence d'un nombre considérable d'espèces chimiques réagissant à travers plusieurs réactions. Cela engendre une importante augmentation du temps de calcul. En revanche, l'utilisation d'un schéma cinétique global peut entraîner des résultats physiques peu fiables, car il n'est que peu représentatif des réactions chimiques réels. Il est néanmoins possible d'utiliser un schéma cinétique réduit afin de limiter le nombre de réactions chimiques et ainsi réduire le temps de calcul en conservant que les réactions chimiques les plus importantes. Cependant, pour y parvenir, cela nécessite une connaissance approfondie des réactions clés dans la physique que l'on souhaite étudier.

2.3.3 Mécanisme cinétique à trois étapes

Ce schéma réduit propose trois réactions élémentaires permettant de conserver l'essentiel d'un mécanisme cinétique en chaînes ramifiées. Il est composé d'une réaction d'initiation suivie d'une réaction de ramification et finalement une réaction de terminaison. Il est représenté par



où k_I, k_B et k_T sont les constantes de vitesse pour chaque étape réactionnelle. La réaction d'initiation est considérée comme thermiquement neutre. Elle permet de produire une faible quantité de radicaux \mathcal{R} à partir du combustible \mathcal{F} . La réaction de ramification est considérée également thermiquement neutre, son contenu est énergétiquement faible afin de permettre un emballement rapide dans la production de radicaux \mathcal{R} . Finalement, la réaction de terminaison exothermique permet de transformer les radicaux en produits de combustion. Il est important de noter que dans un certain nombre de mélanges, le dégagement ou la consommation d'énergie peut être associé avec n'importe quelle étape ou toutes les étapes composant le schéma. Le choix d'associer le dégagement d'énergie uniquement avec la réaction de terminaison vient de la combustion d'hydrogène où cette approximation est d'une très bonne fidélité. Néanmoins, pour les hydrocarbures tel que l'acétylène, l'étape de ramification tel que $\text{C}_2\text{H}_2 + 2\text{O}_2 \longrightarrow 2\text{CO} + 2\text{OH}$ peut aussi dégager de l'énergie [154].

Une généralisation de ce modèle a été proposé par Gary & Yang [155]. Par la suite, Birkan & Kassoy [156] et Short & Dold [157] l'ont appliqué aux détonations. Des études intensives ont été menées pour étudier la stabilité non linéaire des détonations à travers ce mécanisme [24, 158, 159]. Cependant, des applications multidimensionnelles sont moins courantes dans la littérature [27, 160, 161].

2.3.4 Cinétique chimique

L'évolution temporelle d'un système chimique est étudiée par la vitesse à laquelle ce dernier réagit. Avant d'exprimer le taux de dégagement de chaleur associé, il convient d'abord d'introduire quelques notions basiques de degré d'avancement, de taux d'avancement et de taux de réaction. Par définition, le degré d'avancement d'une réaction chimique ξ_r qui permet d'exprimer le nombre de moles en fonction des coefficients stœchiométriques

$$\frac{\partial n_k}{\partial \xi_r} = \nu_{kr} \quad \text{par différentiation} \quad dn_k = \sum_{r=1}^{N_r} \frac{\partial n_k}{\partial \xi_r} d\xi_r = \sum_{r=1}^{N_r} \nu_{kr} d\xi_r \quad (2.34)$$

Le taux de réaction molaire $\dot{\Omega}_k = dC_k/dt$ d'une espèce k est relié au taux d'avancement de la réaction $\dot{\eta}_r = d\xi/dt \times 1/V$ à travers les coefficients stœchiométriques en utilisant l'expression 2.34 donnant la relation suivante

$$\dot{\Omega}_k = \frac{dn_k/V}{dt} = \frac{W_k}{\rho} \frac{dY_k}{dt} = \sum_{r=1}^{N_r} \nu_{kr} \dot{\eta}_r \quad (2.35)$$

On constate sur la relation 2.35 que le taux d'avancement est indépendant de l'espèce considérée. Il s'écrit pour toute réaction r

$$\dot{\eta}_r = \mathcal{K}_r^f \prod_{k=1}^N C_k^{\nu'_{kr}} - \mathcal{K}_r^b \prod_{k=1}^N C_k^{\nu''_{kr}} \quad (2.36)$$

Avec $C_k^{\nu'_{kr}}, C_k^{\nu''_{kr}}$ les concentrations molaires de l'espèce k dans la réaction r . $\mathcal{K}_r^f, \mathcal{K}_r^b$ sont respectivement, les vitesses d'avancement directe et inverse. Elles sont explicitées par une loi empirique initialement proposée par Arrhenius-Kooij [162] en fonction de la température. Elle s'écrit dans le cas d'une réaction directe

$$\mathcal{K}_r^f = k_r^f T^{\beta_r^f} \exp(-E_{ar}^f/R_u T) \quad (2.37)$$

avec

- k_r^f la constante pré-exponentielle
- E_{ar}^f l'énergie d'activation
- β_r^f l'exposant de la température de la réaction r dans le sens direct.

Cette loi a été vérifiée pour un nombre important de réactions chimiques. Elle est expliquée par la théorie des collisions et du complexe activé. À travers ces théories, il est possible de montrer que le facteur pré-exponentiel k représente la fréquence des collisions entre les molécules au sein du mélange, tandis que l'exponentielle représente la fraction de collisions réactives appelée souvent *facteur de Boltzmann*. Ces paramètres doivent être fournis par un schéma cinétique.

Le taux de réaction indirecte est évalué comme le rapport entre la vitesse d'avancement direct et la constante d'équilibre de la réaction $\mathcal{K}_r^b = \mathcal{K}_r^f / \mathcal{K}_r^{eq}$. La constante d'équilibre est obtenue par la minimisation de l'énergie libre de Gibbs [163].

Le taux de réaction molaire pour l'espèce k est alors obtenue en remplaçant dans la relation 2.35 l'expression du taux d'avancement 2.36.

$$\dot{\Omega}_k = \sum_{r=1}^{N_r} \nu_{kr} \left(\mathcal{K}_r^f \prod_{k=1}^N C_k^{\nu'_{kr}} - \mathcal{K}_r^b \prod_{k=1}^N C_k^{\nu''_{kr}} \right) \quad (2.38)$$

On introduit finalement le taux de réaction massique, qui intervient directement dans l'équation de conservation des espèces,

$$\dot{\omega}_k = W_k \dot{\Omega}_k = \frac{dY_k}{dt} = \frac{\rho}{W_k} \sum_{r=1}^{N_r} \nu_{kr} \dot{\eta}_k \quad (2.39)$$

Ce terme dépend de la masse volumique, la température et la fraction massique des espèces. Pour satisfaire la conservation des espèces il vient que $\sum_{k=1}^N \dot{\omega}_k = 0$.

Finalement, le taux de dégagement d'énergie s'exprime par la somme des enthalpies de formation pondérée par les taux de réactions

$$\dot{\omega}_T = - \sum_{k=1}^N h_k^0 \dot{\omega}_k \quad (2.40)$$

Cette quantité permet d'estimer la puissance massique qu'apporte la combustion. La chaleur de réaction massique est définie par

$$q = - \sum_{k=1}^N h_k^0 \nu_{kr} \quad (2.41)$$

2.3.5 Expression des taux de réactions pour les schémas réduits

L'équation de conservation d'une espèce k suit l'expression 2.4, pour un mécanisme cinétique générale. Dans cette sous-section, nous allons présenter l'expression de cette équation dans le cas d'un schéma cinétique simplifié dans le but de modéliser ses processus chimiques dans le code de calcul.

Schéma cinétique global

Le comburant \mathcal{F} est directement convertie en produit \mathcal{P} avec une vitesse de réaction k . La réaction chimique retenue est donc la suivante



L'équation de conservation d'espèce pour le réactif \mathcal{F} s'écrit sous sa forme conservative

$$\frac{\partial \rho Y_{\mathcal{F}}}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i Y_{\mathcal{F}}}{\partial x_i} = \dot{\omega}_{\mathcal{F}} \quad (2.43)$$

où le taux de réaction chimique s'écrit

$$\dot{\omega}_{\mathcal{F}} = -\rho Y_{\mathcal{F}} k \exp(-E_a/R_u T) \quad (2.44)$$

L'expression de l'énergie sensible interne pour ce modèle devient

$$e_s = p/\rho(\gamma - 1) \quad (2.45)$$

La puissance massique apportée par la réaction s'écrit sous la forme

$$q = (1 - Y_{\mathcal{F}})Q \quad (2.46)$$

Avec Q étant la chaleur de réaction.

Schéma cinétique à trois étapes

La réaction s'effectue en trois étapes comme présenté dans 2.3.3. Les équations de conservation pour le réactif \mathcal{F} et l'espèce radicale \mathcal{R} s'écrivent

$$\frac{\partial \rho Y_{\mathcal{F}}}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i Y_{\mathcal{F}}}{\partial x_i} = \dot{\omega}_{\mathcal{F}} \quad (2.47)$$

$$\frac{\partial \rho Y_{\mathcal{R}}}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i Y_{\mathcal{R}}}{\partial x_i} = \dot{\omega}_{\mathcal{R}} \quad (2.48)$$

où les taux de réaction massiques s'écrivent,

$$\dot{\omega}_{\mathcal{F}} = -\dot{\eta}_I - \dot{\eta}_B \quad (2.49)$$

$$\dot{\omega}_{\mathcal{R}} = \dot{\eta}_I + \dot{\eta}_B - \eta_T \quad (2.50)$$

Avec $\dot{\eta}_I, \dot{\eta}_B, \dot{\eta}_T$, les vitesses d'avancement des réactions d'initiation, ramification et terminaison exprimées

$$\dot{\eta}_I = k_I(\rho Y_{\mathcal{F}}) \exp(-E_I/R_u T) \quad (2.51)$$

$$\dot{\eta}_B = k_B(\rho Y_{\mathcal{F}})(\rho Y_{\mathcal{B}})/\bar{W} \exp(-E_B/R_u T) \quad (2.52)$$

$$\dot{\eta}_T = k_T \rho Y_{\mathcal{R}} \quad (2.53)$$

Les constantes de réaction k_I, k_B pour les réactions d'initiation, ramification s'écrivent en fonction de celle de terminaison comme suit

$$k_I = k_C \exp(E_I/R_u T) \quad (2.54)$$

$$k_B = k_C(\bar{W}/\rho) \exp(E_B/R_u T) \quad (2.55)$$

$$k_T = k_C \quad (2.56)$$

Avec

- E_I, E_B étant respectivement les énergies d'activation pour les deux réactions d'initiation et de ramification,
- T_I, T_B étant respectivement les températures auxquelles les vitesses de réaction d'initiation et de ramification deviennent du même ordre que la terminaison.

Finalement, le taux de réaction chimique s'exprime sous la forme suivante :

$$q = (1 - Y_{\mathcal{F}} - Y_{\mathcal{R}})Q \quad (2.57)$$

avec Q la chaleur de réaction.

Les expressions précédentes sont obtenues pour les mécanismes réduits en s'appuyant sur deux hypothèses simplificatrices. Le mélange réactif est considéré comme un mélange thermodynamiquement parfait avec un rapport de capacités calorifiques γ constant. Les masses molaires de chaque composant du mélange sont également égales $W_{\mathcal{F}} = W_{\mathcal{R}} = W_{\mathcal{P}} = \bar{W}$. Ces hypothèses ont permis des simplifications importantes dans l'expression des termes sources chimique dans les équations de conservation des espèces par rapport au modèle original plus complet de Kapila [164]. L'intégration numérique de ces équations fera objet de la prochaine section.

2.4 Synthèse partielle

Ce chapitre permet de présenter les équations générales utilisées dans notre étude. Les équations d'Euler sont d'abord rappelées suivies des deux équations d'états retenues dans cette thèse. Ces équations sont l'équation d'état des gaz parfaits et l'équation d'état Noble-Abel. En deuxième partie, trois mécanismes cinétiques sont présentés à savoir : modèle à une étape, modèle à trois étapes et chimie détaillée sont présentés. Ces notions seront régulièrement utilisées dans la suite du manuscrit.

Méthodes numériques : code RESIDENT

Sommaire

3.1	Introduction	48
3.2	Méthodes numériques	48
3.2.1	Solveur aérodynamique	48
3.2.2	Solveur de Riemann HLLC	52
3.2.3	Intégration temporelle	56
3.2.4	Extension au cas multidimensionnel	57
3.2.5	Intégration des termes sources	58
3.2.6	Intégration de la chimie à trois étapes	59
3.2.7	Condition de stabilité	61
3.2.8	Conditions aux limites	61
3.2.9	Procédure de recyclage du domaine de calcul	62
3.2.10	Raffinement statique de la résolution numérique	63
3.2.11	Maillage curviligne	64
3.2.12	Procédure de calcul des quantités moyennes	65
3.3	Outils de visualisation numérique et de post-traitement	67
3.3.1	Détermination de la vitesse de détonation	67
3.3.2	Strioscopie ou "schlieren" numérique	68
3.3.3	Suivi des points triples	69
3.4	Parallélisation et I/O du code	70
3.5	Cas-Tests de validation	73
3.5.1	Test de Sod	73
3.5.2	Tube à choc multi-espèces	75
3.5.3	Problème de Riemann 2-D	75
3.5.4	Maillage curviligne	79
3.5.5	Détonations idéales	81
3.6	Synthèse partielle	84

3.1 Introduction

Les détonations sont des phénomènes physiques particulièrement exigeants du point de vue des simulations numériques. Les échelles caractéristiques spatiales et temporelles mises en jeu vont du micromètre et de la microseconde jusqu'au mètre et à la seconde. En effet, simuler une configuration expérimentale $\mathcal{O}(m, s)$ nécessite la résolution des échelles chimiques $\mathcal{O}(\mu m, \mu s)$ en passant par la structure cellulaire $\mathcal{O}(mm)$ traversant ainsi six ordres de grandeurs. Un code RESIDENT (*REcycling mesh SIMulation of DEtonations*) de simulation numérique développé au sein de l'équipe a été adapté aux études de cette thèse.

Ce chapitre comporte les choix effectués dans la modélisation numérique de l'écoulement. Les stratégies d'implémentation, d'optimisation et du post-traitement seront présentées en premier lieu, suivies de validations à travers une série de ces tests classiques de la littérature.

3.2 Méthodes numériques

Cette sous-section est répartie en deux parties. Le solveur aérodynamique permettant de résoudre les équations d'Euler non réactives sera présenté en premier lieu suivie de l'intégration des termes sources chimiques. Le schéma numérique est d'abord présenté dans le cas 1-D, puis étendu au cas multidimensionnel par la suite, à l'aide d'un splitting directionnel. La prise en compte des termes sources chimiques sera ensuite décrite.

3.2.1 Solveur aérodynamique

Les équations d'Euler présentées dans la Sous-section 2.1 sont discrétisées via la méthode des différences finies. Ce choix est justifié par la grande simplicité de la méthode quant à l'écriture et son implémentation et les avantages rencontrés dans les temps de calcul. En revanche, elle atteint ses limitations pour les écoulements dans des géométries

complexes.

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

où $U = [\rho, \rho u, \rho E, \rho_k]^T$ et $F(U) = [\rho u, \rho u^2 + p, (\rho E + P)u, \rho_k u]^T$. Le schéma numérique sous sa forme semi-discrète est (voir Section 3.2.3 pour la description temporelle) :

$$\frac{\partial U}{\partial t} = \mathcal{L}_h(U) \quad \text{avec} \quad \mathcal{L}_h(U) = -\frac{1}{\Delta x} (F_{i+1/2} - F_{i-1/2}) \quad (3.2)$$

Le flux numérique $F_{i+1/2}$ sera évalué en deux étapes

- Une reconstruction des variables caractéristiques aux interfaces de chaque cellule à partir des valeurs centrées est effectué à l'aide d'une interpolation MP.
- Une résolution du problème de Riemann aux interfaces suivie du calcul des flux à l'aide d'un solveur de Riemann HLLC-M [165, 166].

Schéma MP (Monotonicity Preserving)

Les schémas MP (*Monotonicity Preserving*) ont été initialement développés par Suresh et Huynh [167]. Ils sont suffisamment précis tout en évitant l'apparition des oscillations au voisinage des discontinuités. Une interpolation d'ordre élevée est utilisée pour déterminer la valeur à l'interface des mailles puis corrigée et *limitée* de sorte à restreindre les oscillations du schéma. Ces limiteurs préservent la monotonie et la précision du calcul.

Ce fut van Leer [168] qui a été le premier à développer la limitation de pente pour des schémas d'ordre 2 (MUSCL, *Monotonic Upwind Scheme for Conservation Laws*) puis Colella et Woodward [169] l'ont étendue à un ordre plus élevé (*Piecewise Parabolic Method*, PPM). Cette méthode est privilégiée ici aux schémas WENO [170] car elle occasionne moins d'erreurs de dissipation et de dispersion pour les chocs et les discontinuités de contact lorsque celles-ci sont de fortes amplitudes [171, 172]. Une interpolation d'ordre 9 est utilisée dans le cadre de notre étude, impliquant ainsi un stencil contenant 9 mailles. La démarche est rappelée ci-après.

- Les variables caractéristiques sont calculées dans un premier temps [173]. Ce calcul est basé sur les matrices de passage, définies à partir des vecteurs propres de la matrice jacobienne $A(U) = \partial F / \partial U : u - c, u$ et $u + c$. Ces matrices de valeurs propres gauches et droites s'écrivent respectivement dans le cas des gaz parfaits,

avec une capacité calorifique constante :

$$L = \begin{bmatrix} b_2/2 + u/2c & -b_1u/2 - 1/2c & b_1/2 \\ 1 - b_2 & b_1u & -b_1 \\ b_2/2 - u/2c & -b_1u/2 + 1/2c & b_1/2 \end{bmatrix}; \quad R = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ u - c & u & u + c \\ H - uc & \frac{1}{2}u^2 & H + uc \end{bmatrix} \quad (3.3)$$

Avec $b_1 = (\gamma - 1)/c^2$, $b_2 = u^2b_1/2$ et $H = c^2/(\gamma - 1) + \frac{1}{2}u^2$. Les variables caractéristiques sont données par

$$w = L(v_j)v \quad (3.4)$$

Afin de s'affranchir du calcul des matrices de passage, il est possible d'évaluer les variables caractéristiques à partir des variables primitives. Elles s'expriment alors

$$w_k^1 = p_{j+k} + \frac{\rho_j c_j + \rho_{j+1} c_{j+1}}{2} u_{j+k} \quad (3.5)$$

$$w_k^2 = p_{j+k} - \frac{\rho_j c_j + \rho_{j+1} c_{j+1}}{2} u_{j+k} \quad (3.6)$$

$$w_k^3 = p_{j+k} + \frac{c_j^2 + c_{j+1}^2}{2} \rho_{j+k} \quad (3.7)$$

pour $k = -4, 4$. La différence avec la méthode [167] est que l'on ne travaille pas avec les flux caractéristiques mais les variables caractéristiques.

Les valeurs aux interfaces $w_{j+1/2}^L$ sont ensuite déterminées. Les valeurs $w_{j-1/2}^R$ sont déterminées par symétrie.

$$w_{j+1/2}^L = (4w_{j-4} - 41w_{j-3} + 199w_{j-2} - 641w_{j-1} + 1879w_j + 1375w_{j+1} - 305w_{j+2} + 55w_{j+3} - 5w_{j+4})/2520 \quad (3.8)$$

Cette méthode de calcul de valeurs à l'interface introduit d'importantes oscillations au voisinage des discontinuités. Afin de remédier à ce défaut, cette interpolation doit être limitée. Deux fonctions sont alors introduites : *median* et *minmod*. Le médian de trois nombre est, par définition le nombre situé entre les deux autres. La fonction $\text{minmod}(x, y)$ est définie comme 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

$$w_{j-1/2}^L \in [w_{j-1}, w_j] \quad (3.9)$$

soit après un changement d'indice

$$w_{j+1/2}^L \in [w_j, w_{j+1}] \quad (3.10)$$

$$w_{j+1/2}^L \in [w_j, w^{UL}] \quad \text{avec} \quad w^{UL} = w_j + \alpha(w_j - w_{j-1}) \quad (3.11)$$

Afin de préserver la monotonie de la solution, il est nécessaire que $w_{j+1/2}^L$ soit inclus dans l'intersection des deux intervalles décrits Eqs 3.9 et 3.10. Cette contrainte est implémentée à l'aide des deux fonctions précédentes, median et minmod. L'appartenance à l'intersection des intervalles(cf. 3.9 et 3.10) s'écrit

$$w_{j+1/2}^L \in [w_j, w^{MP}] \quad (3.12)$$

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

$$w_{j+1/2}^L \leftarrow \text{median}(w_{j+1/2}^L, w_j, w^{MP}) \quad (3.13)$$

La monotonie de la solution est ainsi assurée par cette contrainte sous réserve que de respecter la condition CFL. Cette méthode entraîne néanmoins un inconvénient majeur qui est le "clipping" des extrema, ce qui réduit l'ordre du schéma. La suite de l'algorithme est dédiée à corriger ce défaut.

- Ainsi les intervalles vont être augmentés, mais de façon à rester les mêmes pour des suites de données monotones.

$$w_{j+1/2}^L \in [w^{\min}, w^{\max}] \quad \text{d'où} \quad w_{j+1/2}^L \leftarrow \text{median}(w_{j+1/2}^L, w^{\min}, w^{\max}) \quad (3.14)$$

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

$$w^{\min} = \max[\min(w_j, w_{j+1}, w^{MD}), \min(w_j, w^{UL}, w^{LC})] \quad (3.15)$$

$$w^{\max} = \min[\max(w_j, w_{j+1}, w^{MD}), \max(w_j, w^{UL}, w^{LC})] \quad (3.16)$$

avec

$$w^{MD} = \frac{1}{2}(w_j + w_{j+1}) - \frac{1}{2}d_{j+1/2}^{M4} ; \quad w^{LC} = w_j + \frac{1}{2}(w_j - w_{j-1} + \frac{4}{3}d_{j-1/2}^{M4}) \quad (3.17)$$

et

$$d_{j+1/2}^{M4} = \minmod(4d_j - d_{j+1}, 4d_{j+1} - d_j, d_{j+1}) ; \quad d_j = w_{j-1} + w_{j+1} - 2w_j \quad (3.18)$$

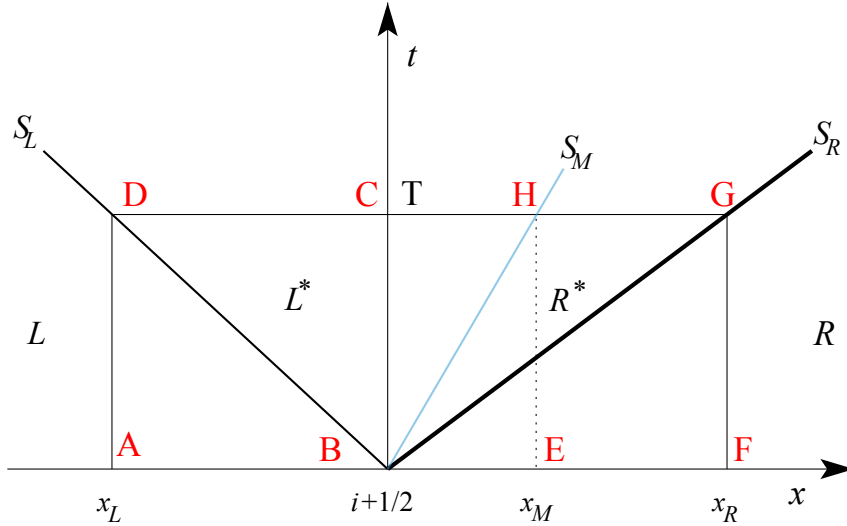


FIGURE 3.1 – Schéma de l'approximation choc-choc du solveur HLLC au point $i + 1/2$, dans un diagramme (x, t) [165].

- Finalement, les variables primitives sont recalculées à travers $w_{j+1/2}^L$:

$$p_{j+1/2}^L = \frac{1}{2}(w_{j+1/2}^{L,1} + w_{j+1/2}^{L,2}) \quad (3.19)$$

$$\rho_{j+1/2}^L = 2 \frac{p_{j+1/2}^L - w_{j+1/2}^{L,3}}{(c_j^2 + c_{j+1}^2)} \quad (3.20)$$

$$u_{j+1/2}^L = \frac{w_{j+1/2}^{L,1} - w_{j+1/2}^{L,2}}{\rho_j c_j + \rho_{j+1} c_{j+1}} \quad (3.21)$$

Cette procédure permet de déterminer les variables aux interfaces des mailles, dont on se servira pour déterminer les flux aux interfaces à l'aide du solveur de Riemann, qui est décrit dans la section suivant.

3.2.2 Solveur de Riemann HLLC

Le solveur de Riemann approché (HLLC) est utilisé dans notre cas pour calculer les flux aux interfaces de chaque cellule afin d'améliorer le solveur HLL développé par Harten, Lax et van Leer [174] pour résoudre le problème de Riemann de façon approchée. Le solveur HLL est robuste et permet de traiter les détonations. Cependant, un seul état étoile sépare les états L et R. Afin de diminuer la dissipation, Toro et al. [175, 176] ont proposé de rajouter une onde supplémentaire S_M , qui permet de traiter la discontinuité de contact. Le calcul des flux par la méthode HLLC est décrit ci-dessous. Soit un volume de contrôle défini sur le plan $x - t$ par $S = [0, T] \times [x_L, x_R]$. En intégrant l'équation d'Euler

1-D de 3.1 dans ce volume, nous obtenons

$$\oint_C (-U\vec{x} + F\vec{t}) \cdot d\vec{C} = 0 \quad (3.22)$$

Le domaine d'intégration est ainsi définie par $d\vec{C} = dx.\vec{x} + dt.\vec{t}$, le bilan de conservation précédent devient

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

L'évaluation de cette intégrale dans un rectangle ABCD, conduit à

$$\int_{x_L}^0 U_L dx - \int_0^T F_L^* dt + \int_0^{x_L} U_L^* dx - \int_T^0 F_L dt = 0 \quad (3.23)$$

U_L et U_L^* sont les variables conservatives des états gauche et à droite. F_L et F_L^* sont les flux correspondants où $F_L = F(U_L)$ et $F_L^* = F(U_L^*)$. Soit après intégration, le flux F_L^* reste à évaluer par

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

Un calcul similaire est effectué dans le rectangle EFGH

$$\int_{x_M}^{x_R} U_R dx - \int_0^T F_R dt + \int_{x_R}^{x_M} U_R^* dx - \int_T^0 F_R^* dt = 0 \quad (3.24)$$

Soit finalement l'expression du flux F_R^*

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

De la même manière

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

$$U_L^* = \left[\begin{array}{c} \frac{\rho_L(S_L - u_L)}{S_L - S_M} \\ \frac{\rho_L u_L(S_L - u_L) + P^* - P_L}{S_L - S_M} \\ \frac{\rho_L E_L(S_L - u_L) - u_L P_L + S_M P^*}{S_L - S_M} \end{array} \right] ; U_R^* = \left[\begin{array}{c} \frac{\rho_R(S_R - u_R)}{S_R - S_M} \\ \frac{S_R - S_M}{\rho_R u_R(S_R - u_R) + P^* - P_R} \\ \frac{S_R - S_M}{\rho_R E_R(S_R - u_R) - u_R P_R + S_M P^*} \end{array} \right]$$

On peut déduire la vitesse d'interface S_M

$$S_M = \frac{\rho_R u_R (S_R - u_R) - P_R - \rho_L u_L (S_L - u_L) + P_L}{\rho_R (S_R - u_R) - \rho_L (S_L - u_L)} \quad (3.25)$$

La pression P^* est par la suite exprimée

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

On déduit les flux F_L^* et F_R^*

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

Les vitesses S_L et S_R sont déterminées à l'aides des estimations de Davis [177]

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

Finalement, les flux $F_{i+1/2}$ aux interfaces des mailles sont donnés par l'échantillonnage suivant

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

Une correction proposée par [166] HLLCM a été apportée à l'implémentation du solveur de Riemann HLLC afin de traiter les effets du carbuncle qui peuvent se manifester quand les ondes de choc de fortes amplitudes sont alignées avec le maillage [178]. Dans notre configuration, cela peut arriver sur les deux directions radiale et axiale, où des ondes de Mach vont se développer de façon privilégiée.

Le solveur de Riemann HLLC est la solution approchée du problème de Riemann sur $x/t = 0$ comme illustré sur la Figure 3.2, où la structure des ondes implique quatre états. Les vitesses minimale et maximale des ondes sont S_L et S_R . La vitesse et la pression d'interface sont alors S_{HLLC}^* et p_{HLLC}^* . Ce solveur, implémenté dans un schéma de type Godunov est capable de bien capturer les lignes de glissement. Cependant, dans le cas des ondes de choc de fortes amplitudes, des instabilités non-physiques de carbuncle sont

présentes. Une façon de s'en affranchir est d'augmenter la diffusion numérique au voisinage du choc, voire uniquement dans la direction transverse. C'est ce dernier choix qui a été plébiscité [166]. On substitue alors l'état v_{HLL} fourni par le solveur diffusif HLL à celui du solveur HLLC l'état v_k . Le Tab. 3.1 récapitule les différences entre les deux solveurs. Le vecteur des variables conservatives est

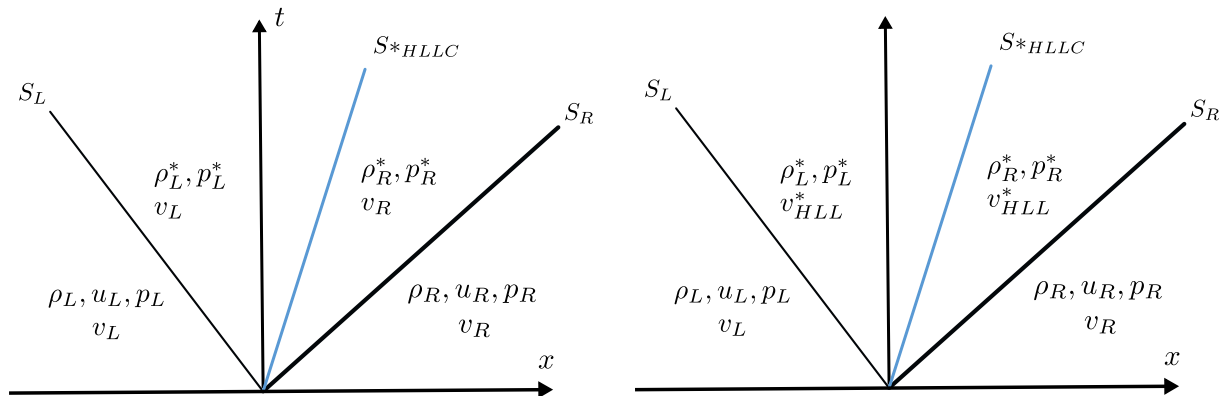


FIGURE 3.2 – Description de la solution du problème de Riemann pour le solveur HLLC. Gauche : états-étoile HLLC, version originale. Droite : version HLLCM [166].

$$U_{HLLC}^* = \begin{cases} U_L & \text{si } x/t \leq S_L \\ U_L^* & \text{si } S_L \leq x/t \leq S_{HLLC}^* \\ U_R^* & \text{si } S_{HLLC}^* \leq x/t \leq S_R \\ U_R & \text{si } x/t \geq S_R \end{cases} \quad (3.26)$$

On se donne les notations suivantes $\alpha_R = \rho_R(S_R - u_R)$ et $\alpha_L = \rho_L(S_L - u_L)$. Par les conditions de saut, on obtient

$$\rho_K^* = \frac{\alpha_K}{S_K - S_{HLLC}^*}, \quad E_K^* = E_K + (S_{HLLC}^* - u_K)(S_{HLLC} + \frac{p_K}{\alpha_K}), \quad K = L, R \quad (3.27)$$

où la vitesse et la pression d'interface sont données par

$$S_{HLLC}^* = \frac{\alpha_R u_R - \alpha_L u_L + p_L - p_R}{\alpha_R - \alpha_L}, \quad (3.28)$$

$$p_{HLLC}^* = \frac{\alpha_R p_L - \alpha_L p_R - \alpha_L \alpha_R (u_L - u_R) p_L - p_R}{\alpha_R - \alpha_L} \quad (3.29)$$

Les vitesses d'onde sont estimées de la même manière que précédemment (i.e la méthode

Schémas	Variables étoiles	Variables transportées
HLLC	$\rho_K^*, S_{HLLC}^*, v_K, p_{HLLC}^*$ $E_K^* = E_K^{*,1d} + \frac{1}{2}v_K^2$	S_{HLLC}^* $(pS)_{HLLC}^* = p_{HLLC}^* S_{HLLC}^*$
HLLCM	$\rho_K^*, S_{HLLC}^*, v_{HLL}^*, p_{HLLC}^*$ $E_K^* = E_K^{*,1d} + \frac{1}{2} \frac{\alpha_R v_R^2 - \alpha_L v_L^2}{\alpha_R - \alpha_L}$	S_{HLLC}^* $(pS)_{HM}^* = p_{HLLC}^* S_{HLLC}^* + \frac{1}{2} \frac{\alpha_R \alpha_L (v_R^2 - v_L^2)}{\alpha_R - \alpha_L}$

TABLE 3.1 – Différences entre les grandeurs physiques pour le solveur de Riemann HLLC et HLLCM

de Davis [165]). Dans ce cas, le flux conservatif pour les états étoiles sont

$$F_{HM,K}^* = \begin{bmatrix} \rho_K^* S_{HLLC}^* \\ \rho_K^* S_{HLLC}^* S_{HLLC}^* + p_{HLLC}^* \\ \rho_K^* v_{HLL}^* S_{HLLC}^* + 0_{HLL}^* \\ \rho_K^* E_{HM,K}^* S_{HLLC}^* + p_{HLLC}^* S_{HLLC}^* + \frac{1}{2} \frac{\alpha_R \alpha_L (v_R^2 - v_L^2)}{\alpha_R - \alpha_L} \\ \rho_K^* S_{HLLC}^* \end{bmatrix} \quad (3.30)$$

avec

$$0_{HLL}^* = \frac{-\alpha_R \alpha_L (v_L - v_R)}{\alpha_R - \alpha_L} \quad (3.31)$$

3.2.3 Intégration temporelle

L'intégration temporelle retenue s'appuie sur un schéma TVD (*Total Variation Diminishing*) d'ordre 3 [179, 180]. Afin d'expliquer la méthode il convient de mettre sous la forme semi-discrète l'équation d'Euler 1-D 3.1. Il vient alors

$$\frac{\partial U}{\partial t} = \mathcal{L}_h(U) \text{ avec } \mathcal{L}_h(U) = -\frac{1}{\Delta x} (F_{i+1/2} - F_{i-1/2}) \quad (3.32)$$

où $F_{i\pm 1/2}$ est le flux numérique dont l'évaluation a été décrite dans le paragraphe traitant du solveur du problème de Riemann. La procédure d'intégration est divisée en trois étapes

$$\begin{cases} U^{(1)} = U^n + \Delta t \mathcal{L}_h(U^n) \\ U^{(2)} = \frac{1}{4} [3U^n + U^{(1)} + \Delta t \mathcal{L}_h(U^{(1)})] \\ U^{(n+1)} = \frac{1}{3} [U^n + 2U^{(2)} + 2\Delta t \mathcal{L}_h(U^{(2)})] \end{cases} \quad (3.33)$$

où Δt est le pas de temps. La valeur de la variable U est présentée à l'instant n par U^n et les solutions intermédiaires par $U^{(k)}$ avec $k = 1, 2$. À la fin de ces étapes, la solution à l'instant $n + 1$ est obtenue par l'écriture

$$U^{(n+1)} = \tilde{\mathcal{L}}_{h,\Delta x}(\Delta t)U^n$$

où $\tilde{\mathcal{L}}_{h,\Delta x}$ est l'opérateur d'intégration spatio-temporel de la partie homogène des équations.

3.2.4 Extension au cas multidimensionnel

L'extension de la stratégie de résolution présentée dans le cadre 1-D à une configuration multidimensionnelle s'effectuera grâce à la méthode de séparation d'opérateur (*operator splitting method*). On parlera ici plus spécifiquement de *splitting directionnel*. On présente le *splitting* de Lie, qui est utilisé [181]

La partie homogène des équations de conservation en trois dimensions s'écrit :

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F(U)}{\partial x} + \frac{\partial G(U)}{\partial y} + \frac{\partial H(U)}{\partial z} = 0 \quad (3.34)$$

L'intégration de la partie homogène des équations va s'effectuer en trois étapes, décrites ci-dessous.

$$\left. \begin{array}{l} \text{PDEs : } \frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F(U)}{\partial x} = 0 \\ \text{ICs : } U^n \end{array} \right\} \xrightarrow{\Delta t} \tilde{U} \quad (3.35)$$

La solution temporaire \tilde{U} est obtenue en intégrant le système d'équations aux dérivées partielles 3.35 en posant U^n comme conditions initiales. Le système 3.36 est ensuite intégré pour une solution initiale \tilde{U} selon la direction y afin d'obtenir la solution temporaire $\tilde{\tilde{U}}$.

$$\left. \begin{array}{l} \text{PDEs : } \frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial G(U)}{\partial y} = 0 \\ \text{ICs : } \tilde{U} \end{array} \right\} \xrightarrow{\Delta t} \tilde{\tilde{U}} \quad (3.36)$$

Finalement, le système 3.37 est intégré sur un pas de temps Δt avec $\tilde{\tilde{U}}$ pour solution initiale selon la direction z afin d'obtenir U^{n+1} .

$$\left. \begin{array}{l} \text{PDEs : } \frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial G(U)}{\partial z} = 0 \\ \text{ICs : } \tilde{\tilde{U}} \end{array} \right\} \xrightarrow{\Delta t} U^{n+1} \quad (3.37)$$

Ainsi l'intégration de la partie homogène du système d'équations se fait en trois étapes séquentielles. Cette stratégie permet d'avoir des structures de données plus réduites. Une écriture formelle de la solution discrète est :

$$\tilde{U} = \mathcal{L}_{h,\Delta z}(\Delta t)\mathcal{L}_{h,\Delta y}(\Delta t)\mathcal{L}_{h,\Delta x}(\Delta t)U^n. \quad (3.38)$$

3.2.5 Intégration des termes sources

La présence d'un terme source $S(U)$ dans l'Eq. 3.1 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 de calcul. Un des moyens de s'affranchir de cette difficulté est d'utiliser des schémas explicites. Après l'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 :

$$\left. \begin{array}{l} \text{PDEs : } \frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F(U)}{\partial x} + \frac{\partial G(U)}{\partial y} + \frac{\partial H(U)}{\partial z} = 0 \\ \text{ICs : } U^n \end{array} \right\} \xrightarrow{\Delta t} \tilde{U} \quad (3.39)$$

$$\left. \begin{array}{l} \text{PDEs : } \frac{dU}{dt} = S(U) \\ \text{ICs : } \tilde{U} \end{array} \right\} \xrightarrow{\Delta t} U^{n+1} \quad (3.40)$$

Intégration de la chimie à une étape

L'intégration du terme source chimique pour un mécanisme à une étape est basée sur un schéma explicite [182]. Les termes sources sont généralement raides, car les temps chimiques sont petits en comparaison avec les temps convectifs. Bien que la méthode

d'intégration nécessite des pas de temps petits, elle est néanmoins robuste. Le taux de réaction utilisé pour modéliser le processus chimique, de type $\mathcal{F} \rightarrow \mathcal{P}$, repose sur la loi d'Arrhenius.

$$\frac{dY_{\mathcal{F}}}{dt} = -kY_{\mathcal{F}}\exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) \quad (3.41)$$

L'équation 3.41 peut être réécrite sous la forme

$$\frac{dY_{\mathcal{F}}}{Y_{\mathcal{F}}} = -kdt \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) \quad (3.42)$$

Soit après intégration

$$Y_{\mathcal{F}}(t) = Y_{\mathcal{F}}(t - dt)\exp\left[-kdt \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right)\right] \quad (3.43)$$

où $Y_{\mathcal{F}}(t - dt)$ est la concentration molaire de l'espèce réactive \mathcal{F} à l'instant précédent. Numériquement, cela se traduit par

$$Y_{\mathcal{F}}^{n+1} = Y_{\mathcal{F}}^n \exp\left[-k\Delta t \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right)\right] \quad (3.44)$$

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

$$\dot{\xi} = Y_{\mathcal{F}}^{n+1} - Y_{\mathcal{F}}^n \quad (3.45)$$

que l'on peut encore écrire

$$\dot{\xi} = Y_{\mathcal{F}}^n \left(\exp\left[-k\Delta t \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right)\right] - 1 \right) \quad (3.46)$$

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

$$Y_{\mathcal{F}}^{n+1} = Y_{\mathcal{F}}^n + \dot{\xi} \quad (3.47)$$

Le terme source chimique est désactivé pour des fractions massiques inférieures 10^{-3} . Cette limitation permet d'obtenir une longueur de réaction finie.

3.2.6 Intégration de la chimie à trois étapes

Le schéma utilisé est implicite pour des raisons de stabilité numérique

$$\frac{dY_{\mathcal{F}}}{dt} = -Y_{\mathcal{F}}S_{\mathcal{F}} \quad (3.48)$$

$$\frac{dY_{\mathcal{R}}}{dt} = Y_{\mathcal{F}}S_{\mathcal{F}} - Y_{\mathcal{R}}k_C \quad (3.49)$$

Avec $S_{\mathcal{F}}$ est une écriture compacte du terme suivant

$$S_{\mathcal{F}} = k_C \left[\exp\left(\frac{E_I}{R_u} \left(\frac{1}{T_I} - \frac{1}{T}\right)\right) + Y_{\mathcal{R}} \exp\left(\frac{E_B}{R_u} \left(\frac{1}{T_B} - \frac{1}{T}\right)\right) \right] \quad (3.50)$$

La discrétisation des équations de conservation 3.48 et 3.49 selon le schéma implicite se traduit par

$$\frac{Y_{\mathcal{F}}^{n+1} - Y_{\mathcal{F}}^n}{\Delta t} = -Y_{\mathcal{F}}^{n+1}S_{\mathcal{F}}^n \quad (3.51)$$

$$\frac{Y_{\mathcal{R}}^{n+1} - Y_{\mathcal{R}}^n}{\Delta t} = Y_{\mathcal{F}}^{n+1}S_{\mathcal{F}}^n - Y_{\mathcal{R}}^{n+1}k_C \quad (3.52)$$

L'expression des fractions massiques

$$Y_{\mathcal{F}}^{n+1} = \frac{Y_{\mathcal{F}}^n}{1 + \Delta t S_{\mathcal{F}}^n} \quad (3.53)$$

$$Y_{\mathcal{R}}^{n+1} = \frac{Y_{\mathcal{R}}^n + \Delta t Y_{\mathcal{F}}^n S_{\mathcal{F}}^n}{1 + k_C \Delta t} \quad (3.54)$$

L'expression des fractions massiques à l'instant $n + 1$ en fonction de l'instant n s'obtient en remplaçant les expression 3.55, 3.56 dans 3.51, 3.52. Il vient alors

$$Y_{\mathcal{F}}^{n+1} = Y_{\mathcal{F}}^n - \frac{\Delta t Y_{\mathcal{F}}^n S_{\mathcal{F}}^n}{1 + S_{\mathcal{F}}^n \Delta t} \quad (3.55)$$

$$Y_{\mathcal{R}}^{n+1} = Y_{\mathcal{R}}^n + \Delta t \frac{Y_{\mathcal{F}}^n S_{\mathcal{F}}^n - k_C Y_{\mathcal{R}}^n}{1 + k_C \Delta t} \quad (3.56)$$

Intégration de la chimie détaillée

La chimie détaillée est intégrée avec avec une méthode semi-implicite inspiré des travaux de Savard et Blanquart [183]. Le terme source dans l'équation de combustion d'un gaz réactifs est séparée par deux termes. Un terme de productions $\dot{\omega}^+$ et un terme de destruction $\dot{\omega}^-$ de sorte à avoir

$$\frac{d\rho Y_k}{dt} = \dot{\omega}_k^+ - \dot{\omega}_k^- \quad (3.57)$$

Il est important de souligner que les deux termes sources sont positifs. Le taux de production $\dot{\omega}_k^+$ est calculé par la somme des contributions des réactions élémentaires de formation

de l'espèce k . D'une façon similaire, le taux de consommation $\dot{\omega}_k^-$ est calculé par la somme des contribution des réactions élémentaires qui mènent à la destruction de l'espèce k . Ils s'écrivent respectivement

$$\dot{\omega}_k^+ = W_k \sum_{\substack{r=1 \\ \nu_{kr} > 0}}^{N_r} \nu_{kr} \mathcal{K}_r \left[\prod_{k=1}^N \left(\frac{\rho Y_k}{W_k} \right)^{-\nu_{kr}} \right] ; \quad \dot{\omega}_k^- = W_k \sum_{\substack{r=1 \\ \nu_{kr} < 0}}^{N_r} \nu_{kr} \mathcal{K}_r \left[\prod_{k=1}^N \left(\frac{\rho Y_k}{W_k} \right)^{-\nu_{kr}} \right] \quad (3.58)$$

Les auteurs ont proposé une intégration du terme source chimique en utilisant un pré-conditionneurs permettant d'approximer la diagonal de la Jacobienne en faisant abstraction des termes de production. Cette méthode permet une intégration implicite des termes de destruction ce qui permet de renfoncer la diagonale de la jacobienne (équation 3.59) et réduire sensiblement le coup de calcul.

$$\mathcal{J}_{k,k} = \frac{\partial \dot{\omega}_k^+}{\partial Y_k} - \frac{\partial \dot{\omega}_k^-}{\partial Y_k} \approx 0 - \frac{\dot{\omega}_k^-}{Y_k} \quad (3.59)$$

3.2.7 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 3.11 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.

3.2.8 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 :

$$\rho_{1-i} = \rho_i, \quad u_{1-i} = -u_i, \quad p_{1-i} = p_i, \quad Y_{1-i} = Y_i \quad \text{pour } i = 1, 10 \quad (3.60)$$

Conditions aux limites d'absorption

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

$$\rho_{1-i} = \rho_i, \quad u_{1-i} = u_i, \quad p_{1-i} = p_i, \quad Y_{1-i} = Y_i \quad \text{pour } i = 1, 10 \quad (3.61)$$

3.2.9 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 3.3 :

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 [184]. 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.
5. Le processus est ainsi répété jusqu'au parcours total du domaine physique par la détonation.

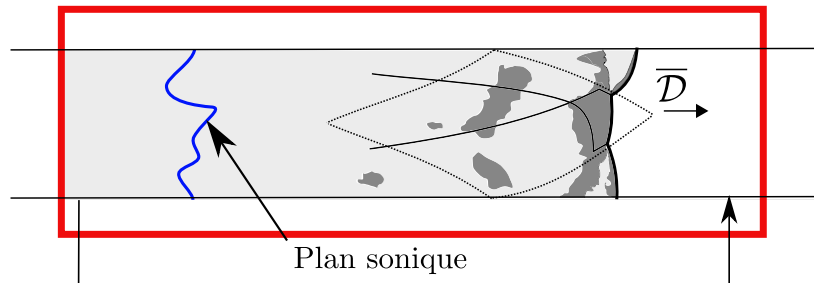


FIGURE 3.3 – Illustration du processus de recyclage.

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 [84, 185, 186].

3.2.10 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 3.4. 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.

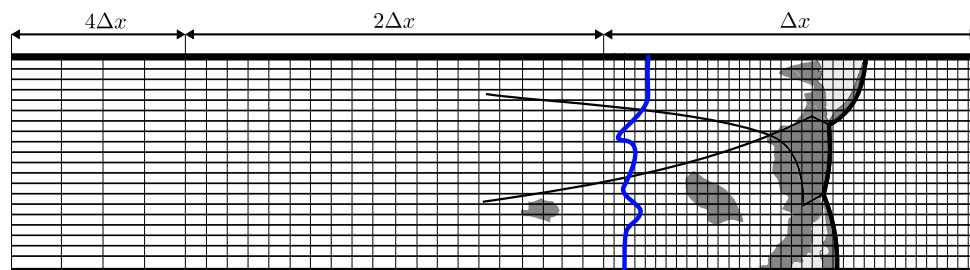


FIGURE 3.4 – Illustration du raffinement statique de la résolution numérique.

3.2.11 Maillage curviligne

Un changement de variable permet de passer d'une configuration cartésienne vers une configuration curviligne. On introduit un changement de variables suivant :

$$x = x(\xi, \eta, \zeta) \quad (3.62a)$$

$$y = y(\xi, \eta, \zeta) \quad (3.62b)$$

$$z = z(\xi, \eta, \zeta) \quad (3.62c)$$

La partie hyperbolique des équations d'Euler 3.34 s'écrivent dans le nouveau repère de la manière suivante

$$\begin{aligned} \frac{\partial U}{\partial t} + \left[\frac{\partial F}{\partial \xi} \xi_x + \frac{\partial G}{\partial \xi} \xi_y + \frac{\partial H}{\partial \xi} \xi_z \right] \\ + \left[\frac{\partial F}{\partial \eta} \eta_x + \frac{\partial G}{\partial \eta} \eta_y + \frac{\partial H}{\partial \eta} \eta_z \right] \\ + \left[\frac{\partial F}{\partial \zeta} \zeta_x + \frac{\partial G}{\partial \zeta} \zeta_y + \frac{\partial H}{\partial \zeta} \zeta_z \right] = 0 \end{aligned} \quad (3.63a)$$

Lorsqu'une détonation subit des pertes latérales comme expliqué dans la section 1.7.2 il en résulte une courbure du front selon la direction des pertes. Dans notre cas, les pertes se font suivant la direction y . La construction d'un maillage épousant la courbure moyenne du front offre un gain considérable dans la taille du domaine pour des simulations tridimensionnelles. On propose alors un changement de variable tenant en compte uniquement d'une courbure du maillage selon la direction y avec un angle variable comme l'atteste la figure A.1. Le passage entre les deux coordonnées se fait à l'aide d'un changement de variable dont un coefficient directeur suivant y définie par $a = \tan(\theta)$. La base reliée à la face de chaque maille est explicité par le vecteur normal $\vec{e}_n = [\sin(\theta) \quad -\cos(\theta)]^\top$ et le vecteur tangent $\vec{e}_\tau = [\cos(\theta) \quad \sin(\theta)]^\top$. Il s'en suit alors

$$\zeta = z \quad (3.64a)$$

$$\eta = y \quad (3.64b)$$

$$\xi = x - y/a \quad (3.64c)$$

Le système d'équations curviligne générale 3.63 se simplifie

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial(F - G/a)}{\partial \xi} + \frac{\partial G}{\partial \eta} + \frac{\partial H}{\partial \zeta} = 0 \quad (3.65)$$

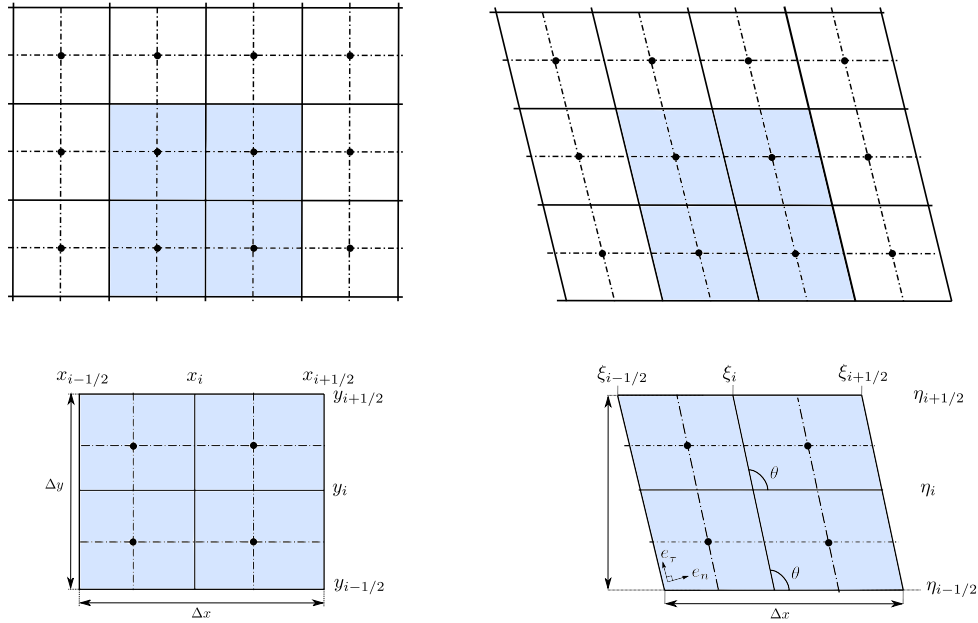


FIGURE 3.5 – Nouvelles coordonnées dans lequel pour le passage de maillage cartésien en curviligne adapté à un front de détonation courbe.

En explicitant la direction ξ - les autres directions restant inchangées, on obtient

$$F - \frac{G}{a} = \begin{bmatrix} \rho(u - v/a) \\ \rho(u - v/a)u + p \\ \rho(u - v/a)E \end{bmatrix} \quad (3.66)$$

Puisque l'équation précédente est hyperbolique, la méthode de splitting directionnel utilisé dans le cas d'un maillage cartésien peut être réutilisée pour le cas curviligne. Avec toutefois une correction supplémentaire sur le flux F dans la direction ξ . Cela simplifie l'implémentation de la nouvelle méthode tout en maintenant un nombre minime de modification. Une conditions sur le coefficient directeur a permet de passer d'une configuration cartésienne ($a \rightarrow \infty$) vers une configuration curviligne. Une description plus détaillée du schéma numérique en volume finie est présente dans l'annexe A.

3.2.12 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 fortement instationnaires. 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 :

$$\bar{\varphi} = \frac{1}{T} \int_{t_i}^t \varphi(\tau) d\tau \quad (3.67)$$

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

$$\bar{\varphi} \cdot T = \int_{t_i}^t \varphi(\tau) d\tau \quad (3.68)$$

Au niveau discret, cela se traduit par

$$\bar{\varphi}^n \cdot \sum_{m=n_i}^n \Delta t^m = \sum_{m=n_i}^n \varphi^m \Delta t^m \quad (3.69)$$

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 alors écrire

$$\bar{\varphi}^{n+1} \cdot \sum_{m=n_i}^{n+1} \Delta t^m = \sum_{m=n_i}^{n+1} \varphi^m \Delta t^m \quad (3.70)$$

En soustrayant les Eqs. 3.69 et 3.70, nous obtenons l'équation ci-dessous

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

ou encore

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

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

$$\bar{\varphi}^{n+1} = \frac{\bar{\varphi}^n t^n + \varphi^{n+1} \Delta t^{n+1}}{t^{n+1}} \quad (3.73)$$

avec $t^{n+1} = t^n + \Delta t^{n+1}$. Ainsi, on obtient

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

qui peut être réécrite de la façon suivante

$$\begin{aligned} \bar{\varphi}^{n+1} - \bar{\varphi}^n &= \bar{\varphi}^n \left(\frac{t^n}{t^{n+1}} - 1 \right) + \varphi^{n+1} \frac{\Delta t^{n+1}}{t^{n+1}} \\ &= \underbrace{\bar{\varphi}^n \left(\frac{t^n - t^{n+1}}{t^{n+1}} \right)}_{-\Delta t^{n+1}/t^{n+1}} + \varphi^{n+1} \frac{\Delta t^{n+1}}{t^{n+1}} \end{aligned} \quad (3.75)$$

d'où

$$\bar{\varphi}^{n+1} - \bar{\varphi}^n = [\varphi^{n+1} - \varphi^n] \frac{\Delta t^{n+1}}{t^{n+1}} \quad (3.76)$$

ou encore

$$\bar{\varphi}^{n+1} = \bar{\varphi}^n + [\varphi^{n+1} - \varphi^n] \frac{\Delta t^{n+1}}{t^{n+1}} \quad (3.77)$$

L'équation 3.77 peut être appliquée à n'importe quelle quantité variant au cours du temps, dont on souhaite connaître la valeur moyenne. La procédure ainsi que l'algorithme de calcul de la position moyenne du front \bar{x}_s et des champs moyens de la détonation est présenté dans l'annexe B.

Les opérations réalisées dans le solveur RESIDENT sont regroupées dans l'organigramme de la figure 3.6.

3.3 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.

3.3.1 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 idéale 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 au voisinage de la paroi inférieure du domaine ($y \sim 0$) 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 [187]. Ce dernier permet de lisser une courbe et d'en extraire les dérivées successives. Il consiste en l'interpolation de polynômes sur des stencils de données 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 [187]. Dans ce travail, des polynômes d'ordre 4 sont utilisés sur des stencils de 9 mailles.

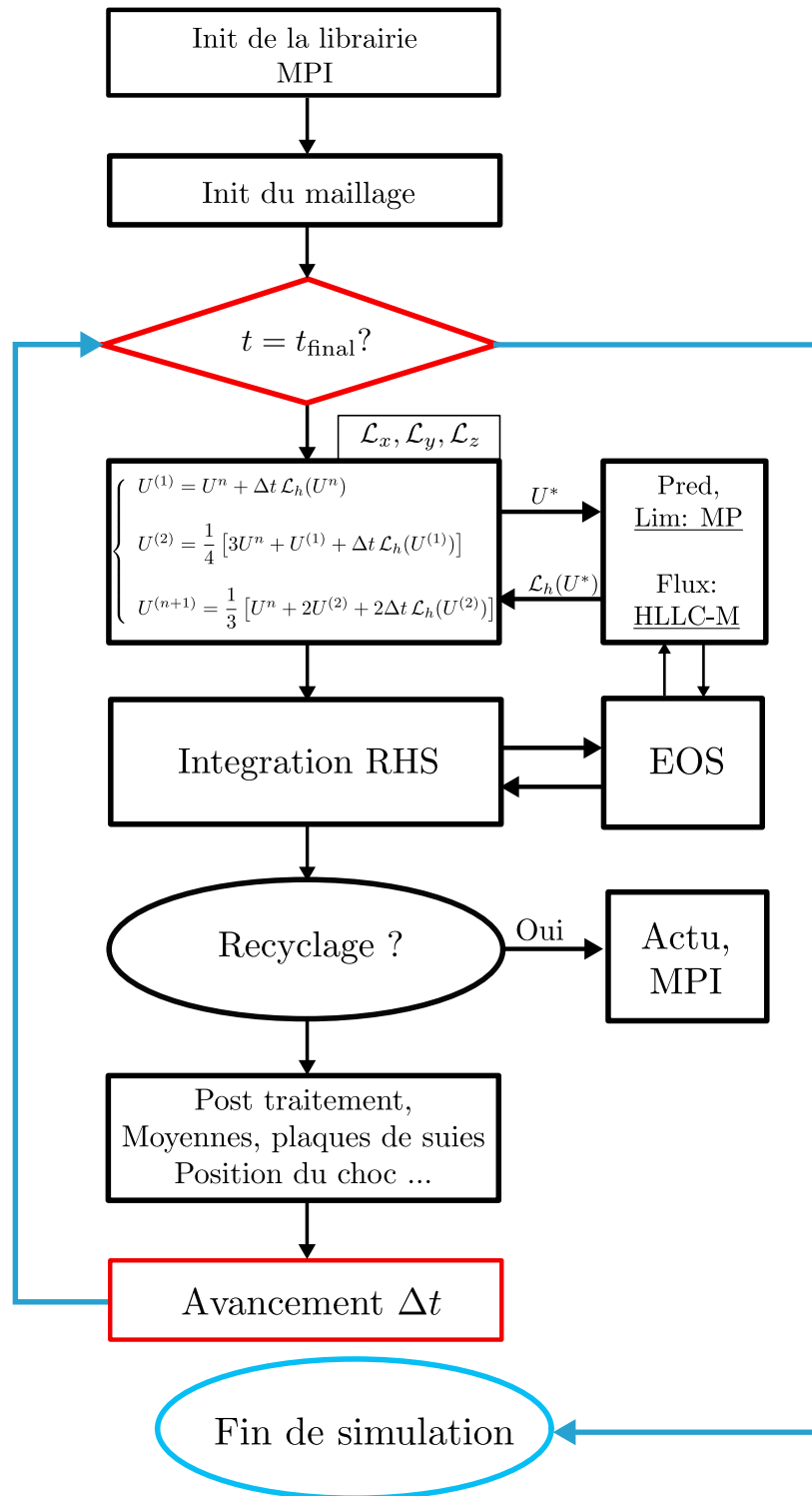


FIGURE 3.6 – Organigramme de fonctionnement du solveur RESIDENT

3.3.2 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 thermodyna-

mique 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 [188]. Pour des écoulements 2-D, la norme du gradient de masse volumique s'écrit

$$\|\nabla\rho\| = \sqrt{\left(\frac{\partial\rho}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial\rho}{\partial y}\right)^2} \quad (3.78)$$

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

$$S(x, y) = \beta \exp\left(-\frac{\varsigma\|\nabla\rho\|}{\|\nabla\rho\|_{max}}\right) \quad (3.79)$$

avec $\|\nabla\rho\|_{max}$, la valeur maximale du gradient de masse volumique dans tout le champ de l'écoulement [189]. 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.

3.3.3 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 les trajectoires des points triples et ainsi avec la trace de la structure cellulaire. $P_T(x, t) = \max_t(p(x, y, t))$, $p(x, y, t)$ étant le champ de pression.

3.4 Parallélisation et I/O du code

Parallélisation du code

La parallélisation du code joue un rôle important pour optimiser la vitesse de calcul. L'augmentation du nombre de processus permet de décomposer le domaine de calcul en sous-domaines où des instructions sont réalisées simultanément. Cela permet de diminuer sensiblement la taille de mémoire utilisée et faciliter le trafic des I/O (Input/Output). À la frontière de chaque sous-domaine, des communications permettent d'échanger les informations avec les processus adjacents afin de satisfaire les conditions aux limites lors du calcul. Dans le code RESIDENT, ces tâches sont réalisées avec la librairie MPI. Une étude de scalabilité faible sur le code de calcul a été réalisée pour une configuration de propagation de détonation en 3-D, avec une chimie à une étape et un coefficient polytropique constant. Le nombre de points est de $145 \times 20 \times 20$, soit 58 000 par processus. Les performances du codes sont ainsi étudiées à travers la notion du *speedup* (accélération) 3.80 définie comme le rapport entre le temps calcul avec 1 processus par rapport à celui de n processus. Dans le cas idéal, cette dernière vaut n .

$$\mathbf{Speed-Up}(n) = \frac{t_f(1)}{t_f(n)} \quad (3.80)$$

Le rendement de la parallélisation s'obtient par le rapport entre *speedup* et le nombre de processus. Cette notion est appelé l'efficacité et se calcul de la manière suivante

$$\mathbf{Efficacité} = \frac{\mathbf{Speed-Up}(n)}{t_f(n)} \quad (3.81)$$

Les calculs sont réalisé sur 500 itérations avec un CFL de 0.2 pour un temps physique de 1 μs . L'écriture des fichiers est désactivée afin d'obtenir une vitesse de calcul indépendante de la vitesse d'écriture sur les disques. Les tests ont été réalisés sur le supercalculateur OCCIGEN du Centre Informatique National de l'Enseignement Supérieur (C.I.N.E.S) [190] qui est une machine de type Bull B720 possédant 3367 nœuds totalisant 86048 cœurs de types Broadwell et Haswell. Elle atteint une puissance crête de 3.5 Pflops/s avec une capacité de stockage de 5 Po. La figure 3.7 regroupe l'ensemble des résultats de cette étude. Un tracé illustre le *speed-up* et de l'efficacité des calculs en fonction du nombre de processus MPI. Il est à noter que le processus de référence est choisi pour $n = 32$ au lieu de $n = 1$ à cause des limites de mémoire qu'offre un seul processus. Le *speed-up* montre une évolution linéaire proche du comportement idéal pour un nombre de processus inférieur à 256 puis un léger décrochage au-delà. Ce comportement est aussi observé dans l'efficacité

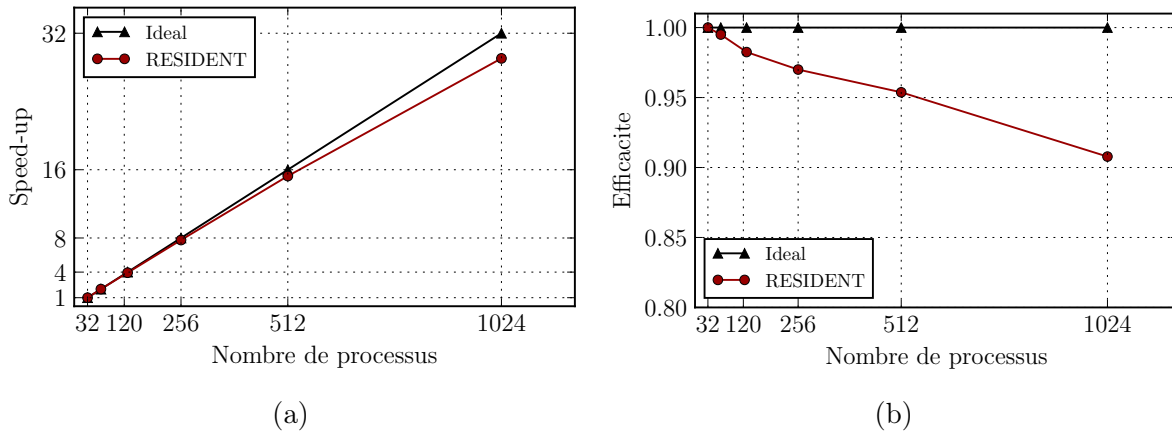


FIGURE 3.7 – Étude de scalabilité à travers le *speed-up* (a) et l'efficacité (b) en fonction du nombre de processus. Processus de référence pour $n = 32$

où on voit que le rendement s'éloigne progressivement du cas idéal jusqu'à chuter à 90%.

I/O du code

Les entrées et sorties (I/O) d'un code de calcul restent un enjeu important de part leurs consommation du temps de simulation et la taille de stockage des données nécessaires pour le post-traitement. Dans la plupart des cas, les champs de vitesses, masse volumique et pression sont stockés à une fréquence précise lors de l'exécution du calcul. Pour un code écrit sous le langage Fortran, le système d'écriture basique se fait par un "accès direct" où les variables sont stockés sous un format binaire pour minimiser la taille. Le fichier ne pourra pas être lu sur la machine comme un quelconque fichier texte. En outre, une exécution parallèle des processus permet d'utiliser deux méthodes d'écriture. La première consiste en chaque processus écrit dans un fichier séparé stockant ainsi les informations de chaque sous domaine. Un post traitement des données sera précédés d'une reconstruction du domaine physique globale. La seconde consiste en l'écriture d'un seul fichier où chaque processus stocke son sous domaine de sorte à reconstruire le domaine physique final. Malgré la vitesse importante d'écriture, la première méthode connaît ses limites lorsque le nombre de processus est suffisamment enlevé. En effet, un nombre considérable de fichier peut être crée ce qui peut saturer le système de fichier des disques durs (ex : une simulation avec 1024 processus de 1 million d'itérations et une fréquence d'écriture de 10 000 engendre 102 400 fichiers au lieu de 100). De la même manière, la seconde méthode à ses limitations bien que le gain en nombre de fichier est considérable. En effet, cette écriture nécessite un passage d'une exécution parallèle du code vers une exécution séquentielle ce qui augmente considérablement le temps de la simulation. Dans l'optique d'optimiser les performances d'écriture, RESIDENT a été couplé à une bibliothèque d'écriture adaptative ADIOS

(Adaptative I/O System) se reposant sur différente méthode (MPI individual IO, MPI collective IO, POSIX IO) et une hiérarchisation des tâches de sorte à accélérer l'écriture. Un fichier final sous forme XML est obtenue pour chaque écriture. Ces fichiers peuvent être directement lu par l'ordinateur à travers des logiciels de post-traitement tels que *Visit* où *Paraview*.

Une étude sur le gain de performance d'écriture a été réalisé afin de quantifier le gain apporté par l'implémentation de la librairie ADIOS. Les test ont été effectué sur le calculateur Thor de l'institut Pprime [191]. La machine est composé de 115 nœuds de calcul avec une capacité de 2300 cœurs pour une puissance de 55 TFlops et une capacité de stockage de 80 To. La première étude consiste à observer l'évolution du temps d'écriture

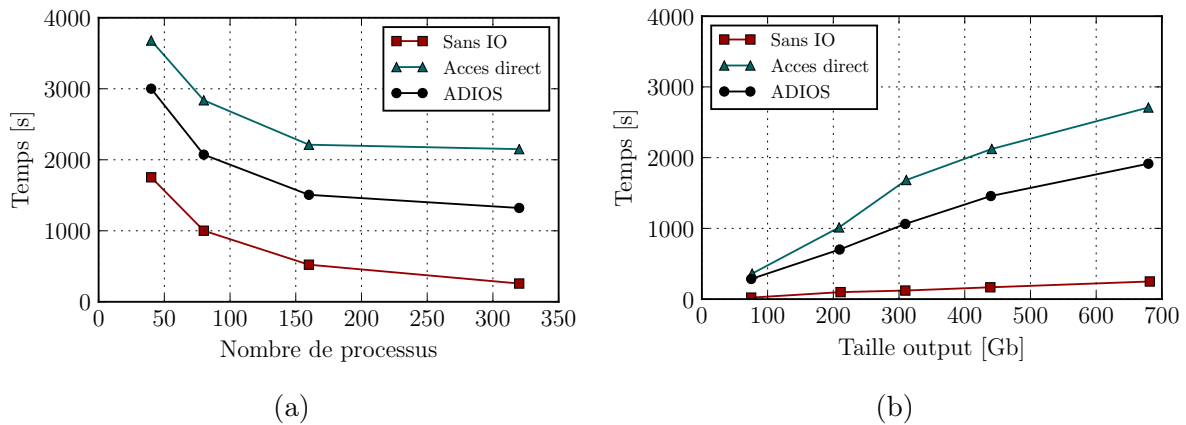


FIGURE 3.8 – Étude des performances d'écriture de fichier à travers. (a) : Temps nécessaire pour écrire 10 fichiers de taille de 680 en fonction du nombre de processus ; (b) : temps nécessaire à écrire 10 fichiers avec 400 processus en fonction de la taille des fichiers

de 10 fichiers, d'une taille de 680 Go chacun en fonction du nombre de processus pour les différentes méthodes d'écriture à savoir "accès direct" et la librairie ADIOS. La figure 3.8a montre le résultats de ce test. On observe que le temps d'écriture décroît sensiblement entre 40 processus et 160 processus. Cette décroissance est dû à la diminution dans la taille des données à écrire pour chaque processus. Au delà cette variation est moindre. La librairie ADIOS est la plus optimale. La seconde étude consiste à observer le temps nécessaire pour réaliser 10 écritures en fonction d'une taille de fichiers variables avec 400 processus. La variation de ce temps en fonction de la taille des données est montrée dans la figure 3.8b. On constate que plus la taille des fichiers est élevée plus le temps nécessaire à l'écriture augmente. De la même manière, la librairie ADIOS semble donner la meilleure performance avec un temps d'écriture inférieur à la méthode d'accès direct.

3.5 Cas-Tests de validation

Des cas-tests de validation sont décrits dans cette sous-section. Ils concernent le tube à choc de Sod, un tube à choc multi-espèces, des exemples de problèmes de Riemann 2-D, et finalement la validation de l'implémentation du 'maillage courbe' dans les cas du tube à choc et de la propagation d'une détonation idéale.

3.5.1 Test de Sod

Le tube à choc [192] est un cas particulier du problème de Riemann. Sod [193] a été probablement le premier à utiliser ce test afin de comparer les résultats des schémas numériques avec la solution analytique. La Figure 3.9 montre les conditions initiales du cas-test, le coefficient polytropique valant 1.4. A l'instant initial, deux gaz au repos sont séparés par un diaphragme, séparant les chambres de haute et de basse pression. La rupture du diaphragme va engendrer la propagation d'une onde de choc, faisant face à droite et un faisceau de détentes se propageant dans la chambre à haute pression. Une discontinuité de contact sépare les deux gaz.

Les calculs ont été effectués sur un domaine de longueur de 1, avec un maillage de 200 points, un temps final de 0.5, une CFL de 0.2 et le schéma MP9. Une comparaison entre la solution analytique et les résultats numériques est présentée sur la figure 3.10. On constate un très bon accord pour les différents champs de masse volumique, de pression, de température et de vitesse entre les résultats numériques et la solution exacte. On peut ainsi visualiser l'onde de choc à $x = 0.82$, la discontinuité matérielle à $x = 0.69$ et le faisceau de détentes entre les abscisses de 0.25 et 0.45. D'autres schémas numériques ont été implémentés. Une comparaison de l'erreur L 1 de la masse volumique a ainsi pu être effectuée. L'intégration temporelle reste la même pour tous, i.e. trois. Le solveur HLLC a été utilisé. Seule l'interpolation spatiale a été modifiée. Les différents schémas sont l'interpolation d'ordre un (pas d'interpolation) [194], les limiteurs de pente Minmod [195], van Leer [168] et Superbee [196] (avec une interpolation des variables primitives densité, vitesse et pression), PPM [169] (variables caractéristiques), WENO5 [197] (variables caractéristiques) et les MP5-9 (variables caractéristiques). D'après la Figure 3.11, l'erreur décroît avec le pas d'espace. L'ordre de l'erreur (pente de la courbe) pour une interpolation d'ordre un est de ~ 0.6 . Elle est de l'ordre de 0.75-0.8 pour minmod, PPM et van Leer. Elle est de 0.9 pour WENO5. Elle augmente de 0.9 à 0.95 pour MP5-9. Superbee a un taux de convergence de 0.95. On constate également que les erreurs les plus basses sont obtenues pour les MP5-9, avec Superbee, qui a l'inconvénient d'être trop compressif dans

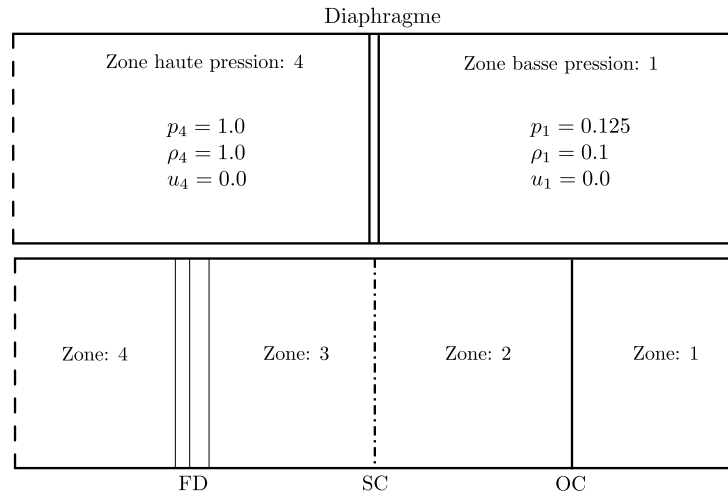


FIGURE 3.9 – Schéma représentant le tube à choc. Haut : état initial. Bas : schéma représentant la propagation des ondes. Les différents états issus de ce problème de Riemann sont numérotés de 1 à 4

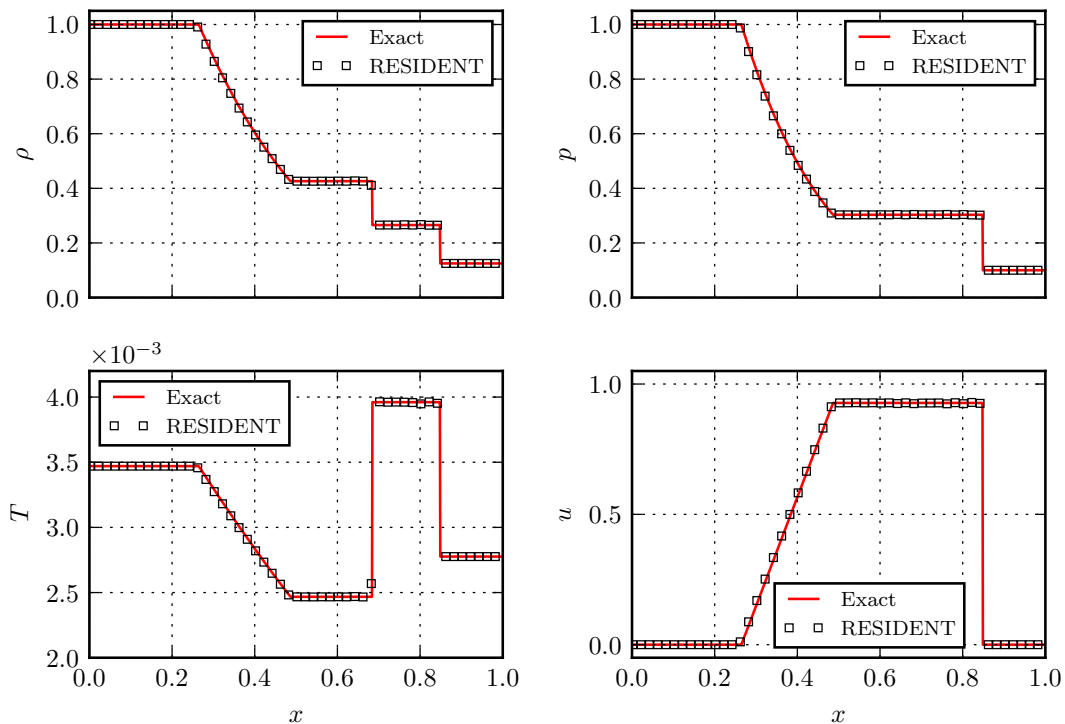


FIGURE 3.10 – Comparaison des profils de masse volumique, pression, température et vitesse matérielle. Le temps final est de 0.5. Seul un point sur quatre est représenté

les détentés. C'est ce qui a plébiscité notre choix d'utiliser MP5-9 dans nos simulations numériques par la suite.

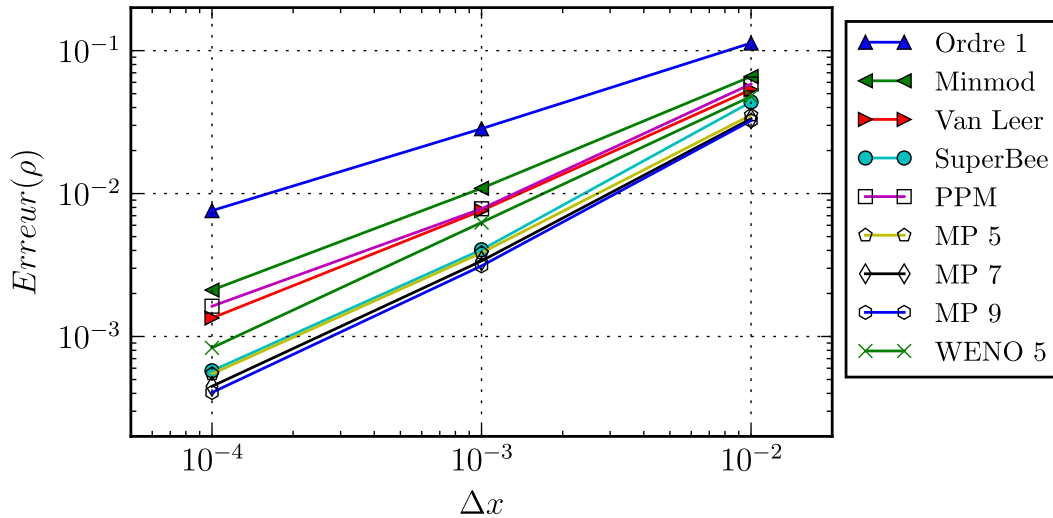


FIGURE 3.11 – Comparaison de l’erreur sur la masse volumique pour les différents schémas numériques par rapport à la solution exacte du tube à choc.

3.5.2 Tube à choc multi-espèces

Afin de valider l’implémentation du couplage de la librairie thermodynamique, un cas-test de tube à choc multi-espèce (Fedwick et al. [198]) a été effectué. Le tube de 10 cm est discrétisé en 200 mailles. La CFL est de 0.2. Le mélange est composé de H_2 , O_2 et d’Ar, dont les fractions molaires sont respectivement de $X_{H_2} = 0.2$, $X_{O_2} = 0.1$, $X_{Ar} = 0.7$. Les conditions initiales dans la chambre haute pression (état 4) sont : $T_4 = 400$ K, $p_4 = 8$ kPa, et dans la chambre basse pression (état 1) : $T_1 = 1200$ K et $p_1 = 80$ kPa. Le temps finale est de $t_f = 0.5 \mu s$. Le coefficient polytropique varie au travers des différentes ondes. On constate sur la Figure 3.12 que les résultats numériques coïncident avec la solution exacte (tirée de Fedkiw et al. [198]).

3.5.3 Problème de Riemann 2-D

Dans le cas 1-D, la solution du problème de Riemann est auto-similaire et consiste en trois ondes. Dans l’extension 2-D, les conditions initiales du problème de Riemann consistent à porter quatre quadrants à des états constants. Ces conditions vont donner naissance à une topologie d’écoulements beaucoup plus riche et complexe que dans le cas 1-D. Les résultats obtenus sont classifiés en 15 configurations (Schulz et al. [199, 200]), dans le cas où l’interaction entre deux états constants ne donne lieu qu’à une seule onde. Ce catalogue sert ensuite de base pour tester de nombreux schémas numériques [201, 202]. Ces tests sont réalisés en considérant un domaine carré de dimensions $\Omega = [0, 1] \times [0, 1]$ partagé

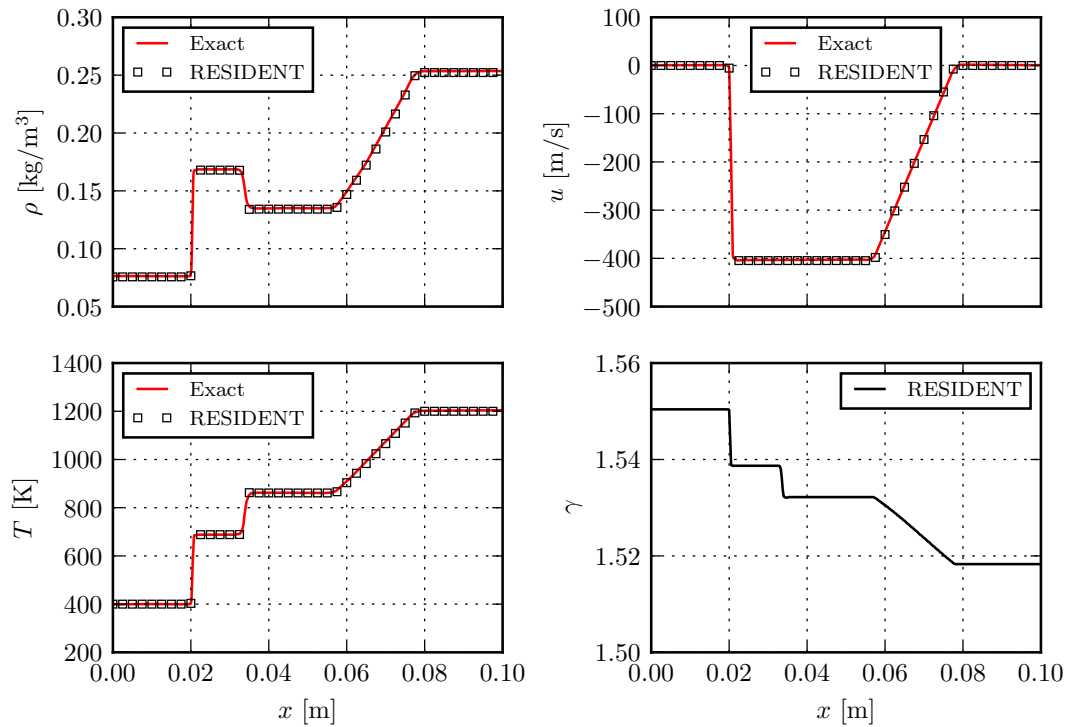


FIGURE 3.12 – Profils de masse volumique, de vitesse, de température et du coefficient polytropique pour le tube à choc multi-espèces.

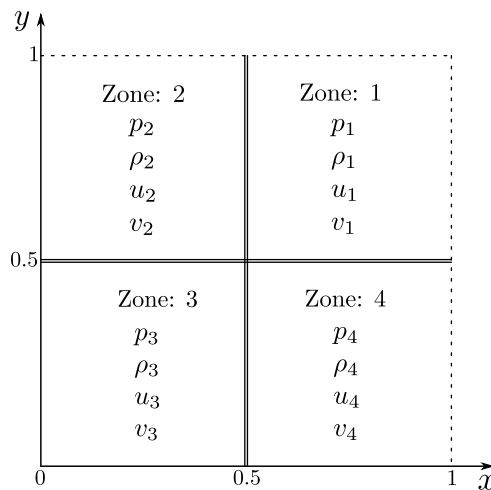


FIGURE 3.13 – Schéma représentatif des conditions initiales pour l'étude du problème de Riemann 2-D.

par 4 quadrants dont les interfaces sont à $x = 1/2$ et $y = 1/2$ comme sur figure 3.13. Dans chaque quadrant, on a un état constant de masse volumique, de pression et de composantes de vitesse u, v . Les conditions initiales dans les quadrants sont regroupées dans le tableaux 3.2 pour 6 cas différents. Les cas sont mono-espèce avec un $\gamma = 1.4$ et une $CFL=0.2$. D'après la terminologie de Lax et Liu [201], les ondes de choc sont notées S, les ondes de détente R et les discontinuités de contact J. Les résultats des différents test sont regroupés sur la Figure 3.14. Le nombre de Mach est représenté avec des iso-contours

TABLE 3.2 – États initiaux dans les quadrants 1-4 des problèmes de Riemann 2-D

2					1			
RP	p	ρ	u	v	p	ρ	u	v
2	0.4	0.5197	-0.7259	0	1	1	0	0
4	0.35	0.5065	0.8939	0	1.1	1.1	0	0
6	1	2	0.75	0.5	1	1	0.75	-0.5
8	1	1	-0.6259	0.1	0.4	0.5197	0.1	0.1
12	1	2	0	0.3	1	1	0	-0.3
16	1	1.0222	-0.6179	0.1	0.4	0.5313	0.1	0.1
3					4			
2	1	1	-0.7259	-0.7259	0.4	0.5197	0	-0.7259
4	1.1	1.1	0.8939	0.8939	0.35	0.5065	0	0.8939
6	1	1	-0.75	0.5	1	3	-0.75	-0.5
8	1	0.8	0.1	0.1	1	1	0.1	-0.6259
12	0.4	1.0625	0	0.8145	0.4	0.5313	0	0.4276
16	1	0.8	0.1	0.1	1	1	0.1	0.8276

de masse volumique.

- **RP₂** : Le test est composé de quatre ondes de détente ($R_{21}, R_{32}, R_{34}, R_{41}$).
- **RP₄** : Le test est composé de quatre ondes de choc ($S_{21}, S_{32}, S_{34}, S_{41}$).
- **RP₆** : Le test est composé de quatre discontinuités de contact ($J_{21}, J_{32}, J_{34}, J_{41}$).
- **RP₈** : Le test est composé de deux ondes de détente et deux discontinuités de contact ($R_{21}, J_{32}, J_{34}, R_{41}$).
- **RP₁₂** : Le test est composé de deux ondes de choc et de deux discontinuités de contact ($S_{21}, J_{32}, J_{34}, S_{41}$).
- **RP₁₆** : Le test est composé d'une onde de détente, de deux discontinuités de contact et d'une onde de choc ($R_{21}, J_{32}, J_{34}, S_{41}$).

Ces différentes configurations peuvent donner naissance à un tourbillon tournant dans le sens anti-trigonométrique, avec une dépression au centre (cas **RP₆**), tout comme des réflexions de Mach à la suite des interactions d'ondes de choc comme dans **RP₄** et **RP₁₂**. Des ondes de choc peuvent également se former alors que seules des ondes de détente sont présentes initialement (**RP₂**). De même, une onde de choc circulaire va se former

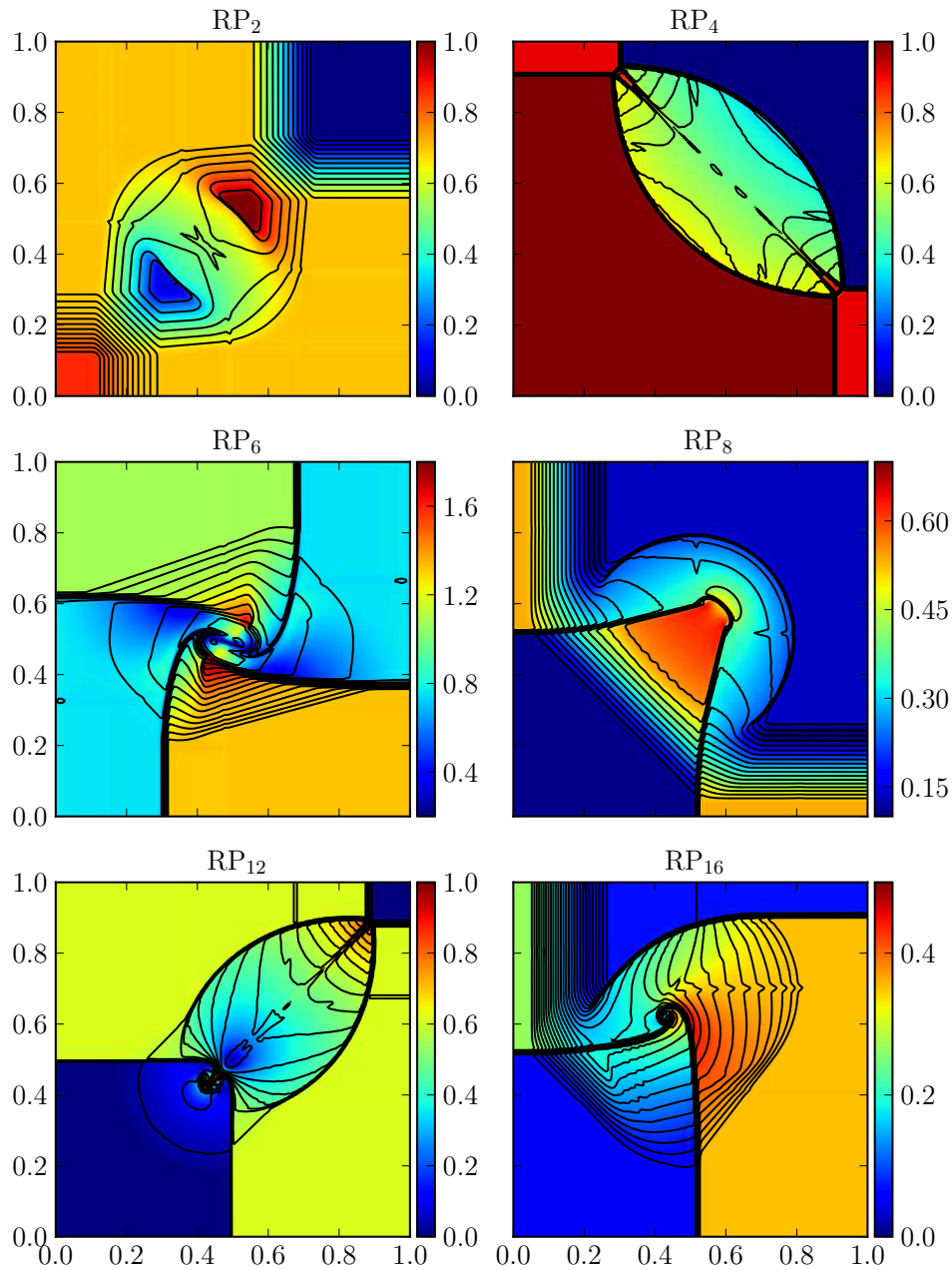


FIGURE 3.14 – Champs de Mach et 20 iso-contours de densité pour 6 tests du problème de Riemann 2-D.

dans le cas \mathbf{RP}_8 (deux détontes et deux discontinuités de contact initiales). Les ondes présentes dans le cas \mathbf{RP}_{16} persistent. Ces configurations 2-D nous montrent la complexité de la topologie des ondes qui peuvent se présenter pour une gamme d'états initiaux, dont pourtant l'interaction deux à deux ne donne lieu qu'à une seule onde. À chaque fois, nous avons pu restituer les solutions numériques des [199, 200].

3.5.4 Maillage curviligne

L'objectif est ici de vérifier que l'utilisation d'un maillage courbe par rapport à un maillage cartésien n'affecte pas la solution numérique. Deux configurations seront testées : le tube à choc et une détonation idéales

Tube à choc

Le canal a 1 mètre de côté. Plusieurs résolutions numériques ont été testées, afin de vérifier la convergence du maillage. Les conditions initiales sont présentées dans le tableau 3.3, les milieux étant initialement au repos. Le maillage utilisé est présenté dans la

p_4	1 bar
ρ_4	1 kg/m ³
γ_4	1.4
p_1	0.1 bar
ρ_1	0.125 kg/m ³
γ_1	1.4

TABLE 3.3 – Récapitulatif des conditions initiales utilisés dans le test de Sod

figure 3.15. Le rayon de courbure du maillage curviligne est de $R = 2.1$ m. Les conditions aux limites à gauche et à droite sont des conditions d'absorption tandis qu'en haut et en bas, des conditions de réflexion sont imposées. Le schéma d'intégration spatial utilisé est le schéma MP ordre 9. Un raffinement allant de 125 à 1 000 mailles dans chaque direction permet d'étudier l'influence de la résolution numérique. On peut constater que les conditions initiales présentent une certaine rugosité qui diminue avec la résolution numérique. La Figure 3.16 montre les profils au centre du canal obtenus après un temps de 0.2 s. Les profils de densité, de vitesse longitudinale et de température sont conformes à ce qui est attendu. On constate néanmoins la présence de fluctuations de la vitesse transverse, qui sont certainement liées aux conditions initiales pas parfaitement rectilignes, mais également à la propagation d'une onde de choc qui n'est pas alignée avec le maillage. Néanmoins, d'après le tableau 3.4, ces erreurs numériques diminuent avec la résolution du maillage. De plus, les fluctuations de la vitesse transverse sont négligeables par rapport à la vitesse horizontale. Les fluctuations sont généralement atténuées pour toutes les variables physiques avec l'augmentation de la résolution. La vitesse longitudinale semble nécessiter plus d'analyse. La sources des fluctuations dans la vitesse v vient de la discontinuité de contact. Le maximum absolu de vitesse atteint est de 0.0225 pour un cas d'une résolution à 125 mailles. Une nette réduction de ses fluctuations est constatée et elles atteignent un

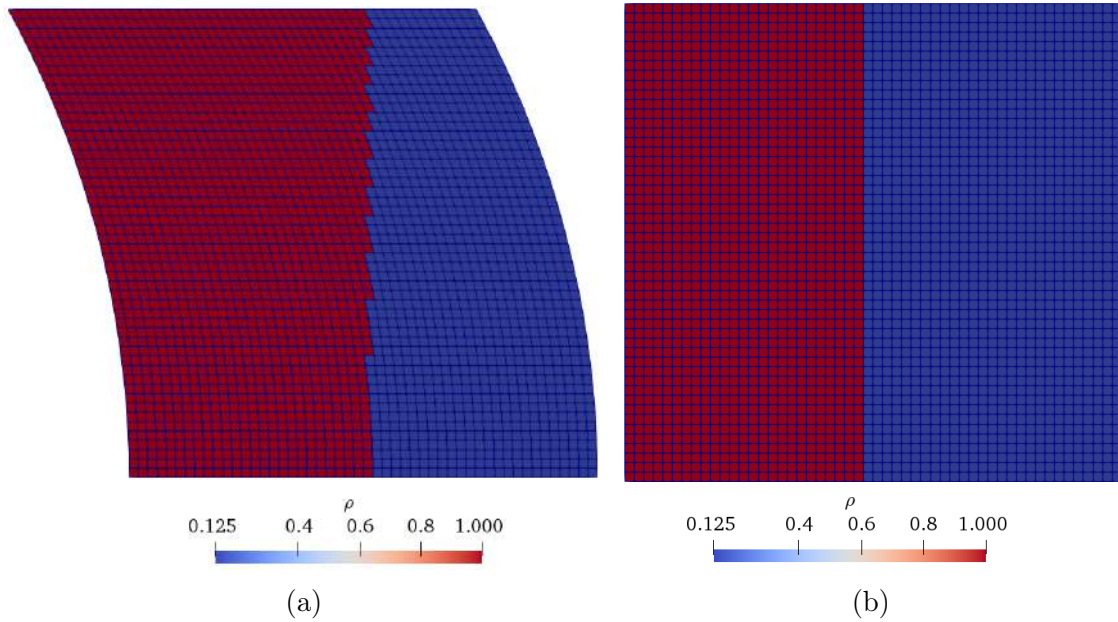


FIGURE 3.15 – Représentation du maillage, (a) curviligne (b) rectiligne et des conditions initiales du test de Sod dans les deux maillages. La résolution est ici de 50 mailles suivant chaque direction

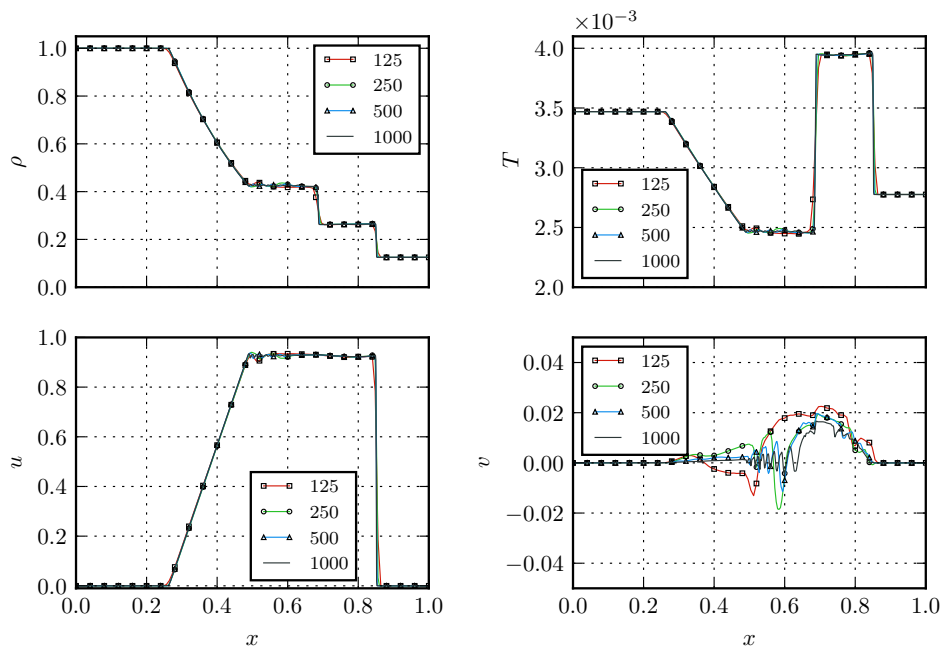


FIGURE 3.16 – Évolution de la vitesse, densité et température dans le tube à choc pour 4 résolutions de maillages : 125, 250, 500 et 1000 mailles dans la direction longitudinale.

maximum de 0.016 dans le cas d'une résolution de 1 000 mailles. La moyenne des vitesses atteint un minimum de 0.0024 qui est à 53% de la moyenne de vitesse calculée dans le cas de 125 mailles. Ces fluctuations sont engendrées par le non alignement du choc avec le maillage dans les conditions initiales. Les informations sont présentées dans le tableau 3.4. La comparaison avec la solution exacte est réalisée avec une simulation à 1000 mailles.

Cas	Max	Min	Avg
125 mailles	2.25×10^{-2}	-1.30×10^{-2}	4.5×10^{-3}
250 mailles	1.95×10^{-2}	-1.85×10^{-2}	3.7×10^{-3}
500 mailles	1.96×10^{-2}	-1.13×10^{-2}	3.4×10^{-3}
1000 mailles	1.66×10^{-2}	-0.46×10^{-2}	2.4×10^{-3}

TABLE 3.4 – Résumé des variation de la vitesse transverse v en fonction de la résolution du maillage

Après 0.2 s de propagation, la densité est utilisée pour calculer l'erreur par la norme L^2 . La figure 3.17 présente une comparaison entre les deux profils. L'erreur sur la densité est $\log|Err(\rho)| = -7.18$.

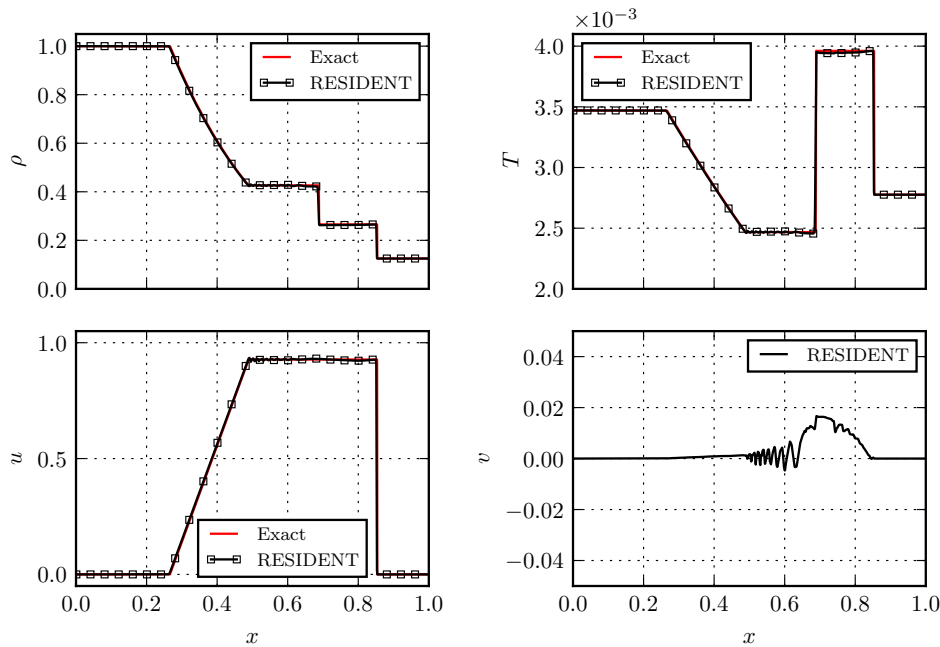


FIGURE 3.17 – Profils de vitesse horizontale, de densité, de température et de vitesse transverse pour le cas-test du tube à choc. Comparaison des résultats numériques avec la solution exacte.

3.5.5 Détonations idéales

La propagation d'une détonation dans un canal 2-D dont la hauteur est du même ordre de grandeur que la taille d'une cellule est étudié dans cette section. L'objectif est de s'assurer que la dynamique des détonations est bien restitué par le code de calcul.

Détonation idéale dans un maillage cartésien

Dans cette sous section, le domaine de calcul est cartésien avec les dimensions $L_x \times L_y = 20 \text{ mm} \times 1.7 \text{ mm}$. La longueur dédiée au calcul est inférieure à la distance totale que la détonation va parcourir du fait de la présence du recyclage (section 3.2.9). Les conditions aux limites amont et avale sont absorbantes tandis que les conditions aux limites supérieure et inférieure sont des parois réfléchissantes. La résolution numérique employée est de $\Delta x = 4.5 \text{ }\mu\text{m}$. Le nombre de mailles est de 1 655 625, réparties sur 200 processeurs avec une CFL de 0.2. Les paramètres thermodynamiques utilisés sont adoptés des travaux de Gamezo [203]. Ils modélisent un mélange réactif composé de $\text{H}_2 - \text{O}_2$ à la stoechiométrie de condition initiales $p_0 = 1 \text{ atm}$ et $T_0 = 300 \text{ K}$. Une réaction chimique globale est employée avec une énergie d'activation réduite de $E_a/RT_0 = 38.23$, une chaleur de réaction $q/RT_0 = 28.83$ et un facteur pré-exponentiel de $A_s = 1.1 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$. La demi-longueur de réaction est de $l_{1/2} = 91 \text{ }\mu\text{m}$. Elle est mesurée à partir de la solution stationnaire ZND. La résolution employée permet d'assurer 20 mailles dans cette longueur chimique.

Le domaine de calcul est remplie initialement par le mélange réactif. L'amorçage de la détonation se fait localement par un dépôt énergétique dans une sphère à l'état vN dans la partie proche de la sortie avale du domaine. Une sur-détonation est obtenue initialement puis s'amortit progressivement jusqu'à atteindre un état stationnaire. Les analyses effectuées sont réalisées à partir de $100 \text{ }\mu\text{s}$ afin d'assurer de la convergence du calcul.

La Figure 3.18 illustre l'écoulement résultant des simulations. Un zoom sur une portion d'intérêt dans le domaine de calcul permet de distinguer les différents éléments qui composent le front de détonation. Le champ de Schlieren numérique (a) montre une structure bi-dimensionnelle composée de deux disques de Mach, qui se sont formés proches des parois du canal et séparés par un choc incident. Ils se caractérisent par une zone de réaction moins épaisse et une courbure plus importante. On peut observer une structure de double réflexion de Mach [204] sur le point triple proche de la paroi supérieure. Le troisième point triple impacte la paroi inférieure du canal. Une poche de gaz frais est présente en aval du front dans la partie supérieure du canal. Elle subit des aller retour d'onde traverse résultant d'une augmentation de sa masse volumique. Le champ de pression présenté dans la Figure 3.18 (b) permet de distinguer les ondes transverses et leur intensités. Le niveau de pression engendré par l'onde transverse venant de la paroi supérieure est bien plus important que celui de la partie inférieure. Ces ondes s'étendent plus loin à l'aval du front. Les régions à haute pression sont situées derrière le front au niveau du second point triple qui forme la double réflexion de Mach et celui qui vient d'impacter la parois inférieure. La

variation de la fraction massique des gaz frais est illustrée dans la Figure 3.18 (c). Il existe deux processus de formation des poches de gaz frais. Le premier provient du déplacement des points triples le long du front. Cela permet de détacher la zone d'induction épaisse du choc incident. Le second provient des lignes de glissement issues elles même du passage du point triple. La collision de deux points triples marque le détachement de la poche du front. Une fois arrachée, elle est convectée vers l'aval. La partie des poches issues du choc incident sont brûlées d'une façon volumique à cause des aller retour d'onde transverse. La partie issues de la ligne de glissement qui enveloppe la poche est brûlé par diffusion numérique. Cette partie subit des instabilités de type Richmayer-Meshkov et Kelvin-Helmoltz qui accélèrent la réaction. La poche de gaz frais située à la partie supérieure du canal en $y \in [1, 1.5]$ mm, $x \in [1.8, 2]$ mm est issue d'un cycle précédent.

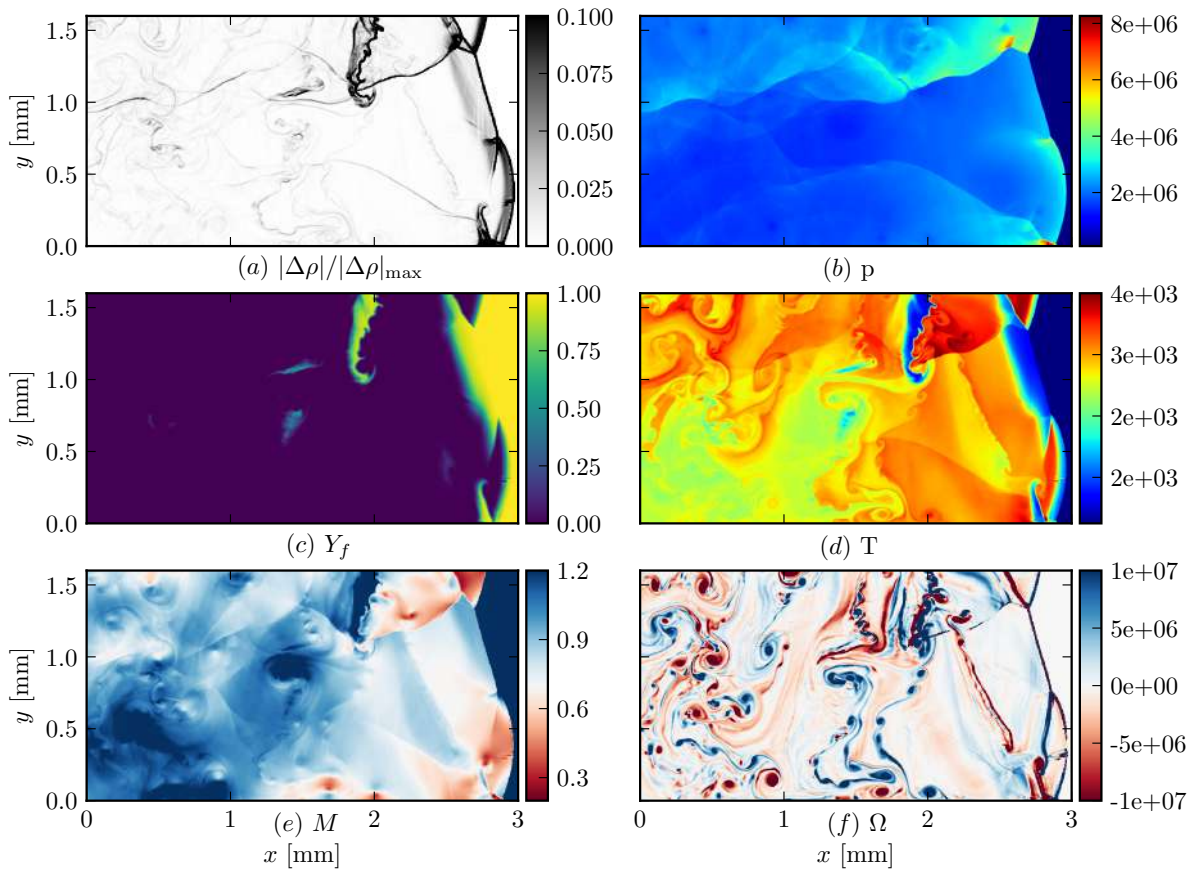


FIGURE 3.18 – Visualisation du front de détonation issu des simulations 2D : (a) Schlieren numérique de masse volumique, (b) pression, (c) fraction massique des gaz frais, (d) température, (e) Mach dans le repère lié à la détonation, (f) vorticité.

Le champ de température présenté dans la Figure 3.18 (d) offre un historique des événements qu'a subit l'écoulement. Les parties froides à l'aval du choc précurseur représentent les zones d'induction et les poches de gaz imbrûlées. Les structures tourbillonnaires à l'aval visiblement également sur la figure de vorticité (f) sont issues de l'interaction des

ondes transverses avec des lignes de glissement.

La Figure 3.18 (e) présente le nombre de Mach dans le repère lié au front de détonation $M = \sqrt{((u - D)^2 + v^2)}/c$. L'écoulement incident est supersonique avec un $M = 5$. Le choc réduit la vitesse de l'écoulement jusqu'à devenir subsonique. Les valeurs atteintes derrière les disques de Mach semblent bien inférieures à celles atteintes derrière les chocs incidents. Elle avoisine $M = 0.25$ sur la paroi supérieure et augmente jusqu'à $M = 0.9$. L'ensemble de l'écoulement accélère jusqu'à atteindre la vitesse du son au niveau de $x = 2$ mm. La vitesse moyenne de détonation, calculée à l'aide de la méthode présentée dans la section 3.3.1 est $D = 2860$ m/s soit une erreur relative de 0.52%.

La trajectoire des points triples est présentée dans la Figure 3.19. Elle est obtenue par une sauvegarde des maxima de pression que connait chaque maille du domaine de calcul. Une seule cellule est observable sur la largeur du canal montrant ainsi le caractère marginal de la propagation. Les cellules sont irrégulières avec parfois une fusion et des extinction des points triples ($x \sim 10$ mm). La qualité du réseau cellulaire est qualifié de modérément irrégulière suivant la classification de Libouton [59]. En outre, cette classification confirme les observations de l'analyse de stabilité linéaire sur l'énergie d'activation utilisé dans ces simulation ($E_a/RT_0 = 38.23$). Les résultats sont qualitativement similaires à la structure cellulaire observée expérimentalement sur les plaques de suies pour le mélange étudié [205]. Cependant, il est à noter que le caractère marginale de la détonation engendre une adaptation de la structure cellulaire à la hauteur du canal contraignant ainsi la largeur de cellules.

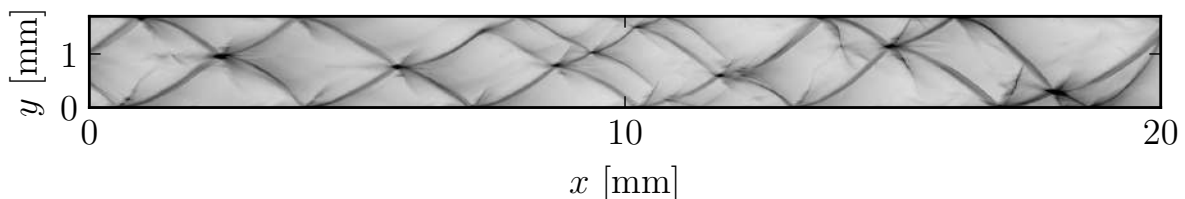


FIGURE 3.19 – Structure cellulaire de la détonation

3.6 Synthèse partielle

Ce chapitre introduit les méthodes numériques utilisées dans le code de calcul RESIDENT. Le modèle retenu est basé sur les équations d'Euler réactives. La résolution numérique repose sur des interpolations numériques d'ordre élevé de type MP ordre 9 sur les variables caractéristiques. La résolution du problème de Riemann s'appuie sur le

solveur HLLC-M qui permet de restituer les flux aux interfaces. Ce schéma se distingue par rapport au schéma classique HLLC par le traitement de l'effet Carbuncle qui se manifeste lorsque les ondes de choc s'alignent avec le maillage. L'intégration temporelle est réalisée à l'aide d'un schéma Runge-Kutta d'ordre 3. Les méthodes d'intégration des termes sources chimiques pour les modèles à une étape, trois étapes et chimie détaillée sont également présentées.

Une stratégie de réduction du temps de calcul a été par la suite exposée et des outils de post-traitement adaptés à la détonation sont également présentés. Les améliorations apportées au code de calcul afin qu'il s'adapte aux besoins des calculs à haute performance sont déclinées.

Une stratégie de maillage curviligne a été développée durant cette thèse en vue d'une utilisation ultérieure dans des configuration complexes.

La fin du chapitre présente les résultats de validation : test de Sod mono-espèce en maillage cartésien et en maillage curviligne, tube à choc multi-espèce, problème de Riemann 2-D et propagation de détonation idéale marginale.

Influence de l'équation d'état sur la structure cellulaire de la détonation gazeuse

Sommaire

4.1	Introduction	87
4.2	Considérations théoriques	91
4.2.1	Thermodynamique	92
4.2.2	Relations de choc	92
4.2.3	Relations de Chapman-Jouguet	93
4.3	Propriétés du mélange	95
4.4	Solution stationnaire ZND	96
4.5	Détonation 2-D	96
4.5.1	Dynamique du front de détonation	98
4.5.2	Comparaison des profils moyens	99
4.6	Structure cellulaire	99
4.7	Origine de l'instabilité	101
4.8	Synthèse partielle	108

4.1 Introduction

Les détonations à haute pression peuvent être rencontrées dans différentes configurations, telles que les accidents industriels [206], liés par exemple au stockage de l'hydrogène. De même, dans le domaine de la propulsion [207] où la pression d'injection dans la chambre pourrait se faire à pression élevée.

Les travaux de recherche théoriques et expérimentaux consacrés aux détonations se concentrent sur deux régimes bien distincts [208, 209]. Le premier régime est rencontré dans les milieux condensés [210, 211], explosifs poreux ou liquides [212]. Ces milieux sont caractérisés par une masse volumique initiale $\rho_0 = 800\text{-}2000 \text{ kg/m}^3$, avec une vitesse de détonation $D = 6 - 9 \text{ km/s}$. Les pressions engendrées sont de l'ordre de $p_{CJ} \sim 10 \text{ GPa}$. Le second régime est celui des milieux gazeux aux conditions atmosphériques et sub-atmosphériques, caractérisés par des masses volumiques initiales de $\rho_0 = 0.1 - 1 \text{ kg/m}^3$ et des vitesses de propagation de $D = 1 - 2.5 \text{ km/s}$ et $p_{CJ} \sim 1 \text{ MPa}$. Cependant, les mélanges intermédiaires dont les conditions initiales de pression et la masse volumique situées entre ces deux régimes, $\rho_0 = 1 - 250 \text{ kg/m}^3$ sont peu étudiés. La Figure 4.1

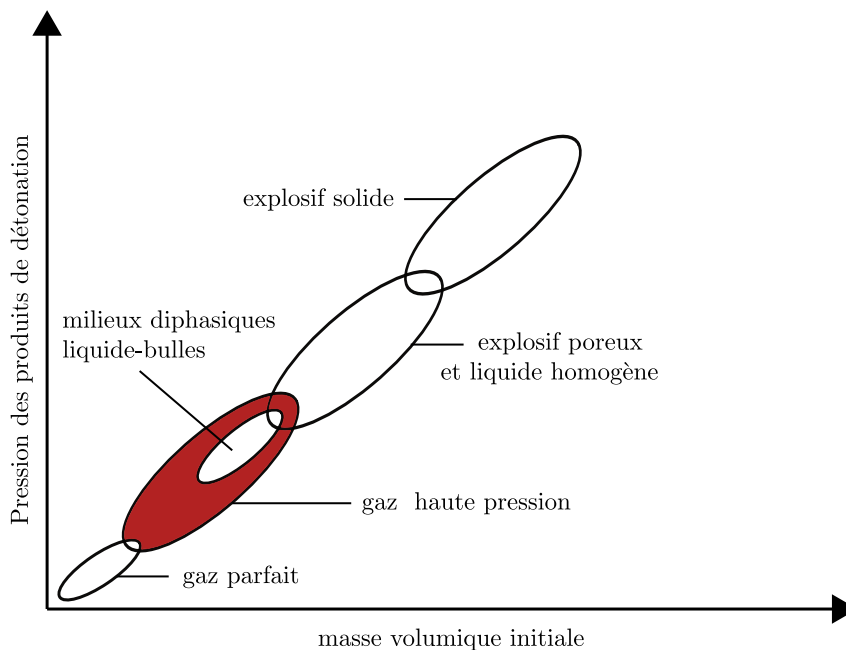


FIGURE 4.1 – Schéma illustratif des régimes de détonation à travers la pression des produits de détonation en fonction de la masse volumique initiale. Adapté de Schmidt et Butler [208].

illustre les régimes cités précédemment [208]. La pression des produits de détonation est représentée en fonction de la masse volumique initiale pour chaque régime allant des gaz parfaits aux explosifs solides condensés. La zone colorée en rouge représente le régime de détonation de gaz à haute pression. Elle se situe entre les gaz aux conditions atmosphériques où l'hypothèse de gaz parfaits reste valable et les milieux liquides et solides où les équations d'état font l'objet d'études approfondies dans la littérature [210, 213, 214]. Pour décrire correctement ces effets, il convient d'ajouter des termes correctifs au modèle d'équation d'état des gaz parfaits. En effet, les hypothèses émises pour le cas d'un gaz parfait à savoir, l'absence d'interactions intermoléculaires et le volume des molécules négligeable devant le volume total disponible pour les molécules ne sont plus

valables [215, 216]. L'influence de l'augmentation de la pression et de la masse volumique sur les propriétés thermodynamiques est souvent référée comme "effet non-idéal" ou "effet de gaz réel" [217]. Les premières études expérimentales de détonation à haute pression

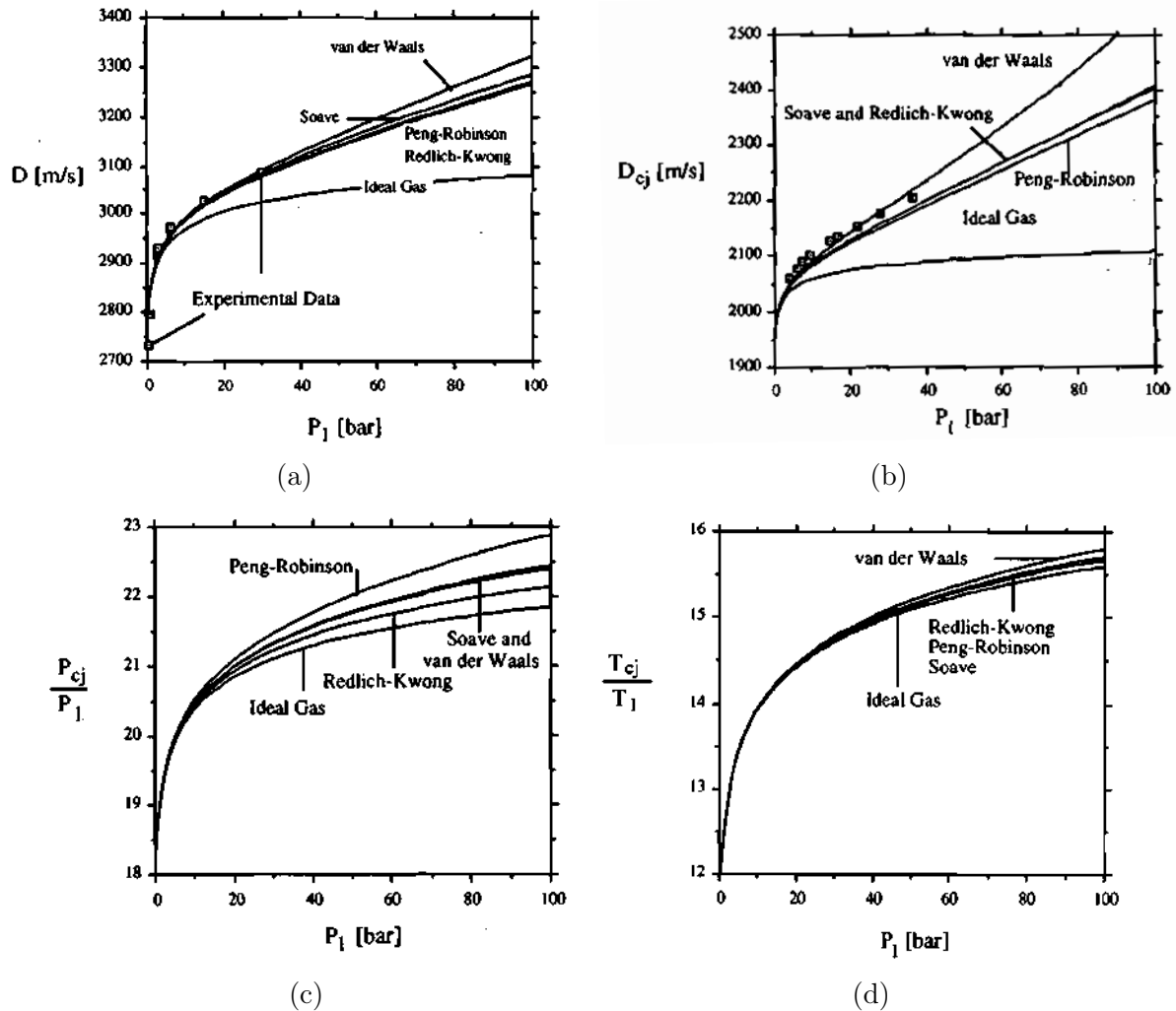


FIGURE 4.2 – Comparaison entre des mesures expérimentales et des calculs théoriques de l'état CJ avec plusieurs équations d'état en fonction de la pression initiale à la température $T_0 = 300$ K. (a) : Vitesse de détonation pour un mélange $2H_2 - O_2$; (b) : Vitesse de détonation pour un mélange $C_3H_8 - 4.3O_2 - 8.7N_2$; (c) : Pression à l'état CJ pour un mélange $H_2 - O_2$; (d) : Température CJ pour un mélange $H_2 - O_2$. Points expérimentaux tirés de Bauer [218].

initiale $p_0 = 0.1 - 7$ MPa ont été rapportées au début des années 1960 par Gealer et al. [219]. Les auteurs ont mesuré les vitesses de détonation pour un mélange $H_2 - O_2$ de fraction molaires $X_{H_2} = 40-80\%$. Les mesures expérimentales de la vitesse de détonation n'étaient pas parfaitement restituées, quand l'équation d'état des gaz parfaits était utilisée. Une extension de cette étude a été rapportée par la suite durant les années 1980 pour des mélanges d'hydrocarbures mettant en place ainsi une base de données regroupant les différentes vitesses de détonation à différentes richesses, dilutions par du diazote et pour

différentes pression initiales [220-223].

Les mélanges étudiés sont $\text{H}_2 - \text{O}_2$ et $\text{H}_2 - \text{air}$ à des pressions allant jusqu'à $p_0 = 20$ bar, $\text{C}_2\text{H}_6 - \text{O}_2 - \text{N}_2$ et $\text{C}_3\text{H}_8 - \text{O}_2 - \text{N}_2$ à des pressions initiales allant jusqu'à $p_0 = 40$ bar, et finalement, $\text{CH}_4 - \text{O}_2$, $\text{C}_2\text{H}_4 - \text{O}_2 - \text{N}_2$ et $\text{CH}_4 - \text{O}_2 - \text{N}_2$ à des pressions allant respectivement jusqu'à 75, 300 et 400 bar. La température initiale est identique pour tous les mélanges à savoir $T_0 = 300$ K. En outre, la vitesse théorique CJ a été calculée en utilisant des équations d'état prenant en compte les effets de la pression initiale. La comparaison entre les mesures expérimentales et les calculs théoriques montrent que prendre en compte ces effets permet de restituer les mesures expérimentales. À titre d'exemple, la vitesse de détonation pour un mélange $\text{H}_2 - \text{O}_2$ aux conditions initiales $p_0 = 100$ bar, $T_0 = 300$ K est de $D = 3079$ m/s lorsqu'elle est calculée par l'équation d'état des gaz parfait tandis qu'elle est de $D = 3297$ m/s lorsqu'elle est calculée par l'équation d'état Redlich-Kwong-Soave (RKS) [224]. Les expériences réalisées dans cette étude montrent alors que l'équation RKS a une meilleure prédiction des mesures expérimentales.

Une étude importante a été réalisée par Schmidt & Butler [208, 209] dans l'optique de développer un outil standard permettant d'appliquer différentes équations d'état (gaz parfaits, van der Waals, Redlich-Kwong-Soave et Peng-Robinson) couplées à un modèle cinétique de chimie détaillée pour des mélanges à haute pression. Cet outil regroupe les modèles CJ et ZND. Pour illustrer le comportement général de la vitesse de détonation en fonction de la pression initiale, deux mélanges réactifs à savoir $\text{H}_2 - \text{O}_2$ et $\text{C}_3\text{H}_8 - \text{Air}$ à température $T_0 = 300$ K sont représentés respectivement dans les Figures 4.2a, 4.2b. Les vitesses théoriques sont calculées par l'intermédiaire des équations d'état citées précédemment puis comparées aux données issues de la thèse de Bauer [218]. Les calculs obtenus par l'équation d'état des gaz parfaits commence à s'écarter des mesures expérimentales à partir d'une pression initiale de 10 bar. Pour un mélange $\text{H}_2 - \text{O}_2$, les équations d'état des gaz réels donnent une excellente estimation de la vitesse de détonation sur toute la plage de pression. En revanche, pour un mélange $\text{C}_3\text{H}_8 - \text{Air}$ l'équation d'état van der Waals offre une meilleure prédiction des vitesses. Les Figures 4.2a et 4.2b présentent l'évolution des températures et des pressions T_{CJ} et P_{CJ} , calculés pour différentes EOS, en fonction de la pression initiale, pour un mélange $\text{H}_2 - \text{O}_2$. La température au point CJ semble être peu influencée par les effets de la pression initiale tandis que la pression CJ prédite par les EOS des gaz réels s'éloigne de celle prédite par l'EOS des gaz parfaits.

Une étude expérimentale effectuée par Manzhalei et al. [225] a montré que la structure cellulaire n'était pas affectée par l'augmentation de la pression initiale de 2 à 10 bar, pour plusieurs pré-mélanges gazeux. D'un point de vue phénoménologique, l'extinction et l'amorçage de la détonation entre autres dépendent de la structure cellulaire, i.e. taille

de cellule et régularité. A minima, deux ingrédients de modélisation sont nécessaires pour appréhender la structure cellulaire de la détonation. Ce sont la cinétique chimique et l'équation d'état.

Dans le cas d'une chimie globale à une étape, la régularité de la détonation dépend de trois facteurs : la chaleur de réaction, le rapport des chaleurs spécifiques et l'énergie d'activation réduite (voir section 1.3). Dans le cas d'une chimie détaillée, Radulescu [112] et plus tard Ng [73] ont montré en se basant sur les travaux théoriques de Short et Sharpe [157] sur le déclenchement des instabilités d'une chimie à trois étapes, que le facteur χ était plus à même de décrire la régularité de la structure cellulaire de la détonation dans le cas général. Plus récemment, l'influence du rapport des chaleurs spécifiques a été étudiée par [226-228]. Des bifurcations d'ondes de choc ont été observées lors de la réflexion de points triples dans le cas inerte, pour des ondes de choc de même amplitude et d'angle d'incidence proches des conditions de détonation. En comparant ces résultats numériques avec ceux d'une base de données expérimentale dans les cas inerte et réactif, ils concluent que ce mécanisme contribuerait à la genèse de nouveaux points triples et pourrait ainsi être à l'origine de l'irrégularité de la structure cellulaire. Les instabilités se produisent d'autant plus que le rapport des chaleurs spécifiques tend vers un et que le nombre de Mach est important. À partir d'une analyse linéaire dans la limite newtonienne des ondes de choc fortes, Clavin [14, 229] montre que l'interaction onde de choc-vortex peut engendrer des ondes de Mach et ainsi que de nouveaux points triples.

Nous allons ainsi dans ce chapitre confronter deux équations d'état (EOS : Equation Of State) afin d'en étudier l'influence sur la structure cellulaire, et ce pour une même cinétique chimique simplifiée. Les deux EOS de cette étude sont l'EOS des gaz parfaits (GP) et l'EOS Noble-Abel (NA). Après avoir rappelé les équations de conservation, les relations de choc seront explicitées. La solution laminaire ZND sera ensuite présentée. Des simulations numériques seront analysées via la dynamique du front de détonation et la comparaison des profils moyens. Après analyse de la structure cellulaire, le mécanisme d'amplification des instabilités sera mis en évidence, ainsi que son origine.

4.2 Considérations théoriques

Des EOS complexes permettant de prendre en compte les effets de la pression pour les gaz réels ont été envisagées par entre autres, Sirignano et al. [217, 230], Le Métayer et al. [135] Radulescu [137], qui ont notamment montré que la dynamique des ondes ainsi que les relations de choc pouvaient être profondément modifiées. Dans le cadre de notre étude,

le choix s'est porté sur l'équation Noble-Abel, pour sa simplicité d'implémentation et pour le fait que c'est l'EOS la plus simple qui permet de prendre en compte le volume occupé par les molécules. Elle a été introduite dans la section 2.2.4. Cette EOS est convexe [135, 137], permettant ainsi l'utilisation de schémas à capture de choc, qui sont basés sur un solveur de Riemann approché comme dans RESIDENT.

4.2.1 Thermodynamique

Les fonctions thermodynamiques, les relations de choc ainsi que les relations de Chapman-Jouguet sont explicitées dans le cas de l'EOS NA. L'énergie interne peut s'exprimer sous la forme suivante dans le cas réactif ($v = 1/\rho$ étant le volume massique) :

$$e = \frac{p(v - b)}{\gamma - 1} + Y_f Q \quad (4.1)$$

La vitesse du son est obtenue par l'expression suivante :

$$c^2 = \left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_s \quad (4.2)$$

soit

$$c^2 = \frac{\gamma p}{\rho(1 - b\rho)} \quad (4.3)$$

On peut noter une correction $1 - b\rho$ dans les expressions de l'énergie interne et de la vitesse du son par rapport à l'EOS GP. La température peut être obtenue, en considérant une capacité calorifique constante.

$$e = c_v T + Y_f Q \quad (4.4)$$

4.2.2 Relations de choc

Les équations de Rankine-Hugoniot pour un choc droit sont les suivantes :

$$\text{Masse : } \rho u = \rho_0 u_0 \quad (4.5)$$

$$\text{Quantité de mouvement : } p + \rho u^2 = p_0 + \rho_0 u_0^2 \quad (4.6)$$

$$\text{Énergie : } h + \frac{1}{2} u^2 = h_0 + \frac{1}{2} u_0^2 \quad (4.7)$$

avec l'indice 0 correspondant aux conditions en amont du choc. L'enthalpie est $h = e + p/\rho$, soit

$$h = \frac{\gamma p}{(\gamma - 1)\rho} \left(1 - \frac{b\rho}{\gamma} \right) \quad (4.8)$$

Les relations de saut pour la masse volumique, la pression, la température et la vitesse peuvent alors être obtenues

$$\frac{\rho}{\rho_o} = \frac{M_o^2(\gamma + 1)}{M_o^2(\gamma + 1) - 2(1 - b\rho_o)(M_o^2 - 1)} \quad (4.9)$$

$$\frac{p}{p_o} = \frac{2\gamma M_o^2 - (\gamma - 1)}{\gamma + 1} \quad (4.10)$$

$$\frac{T}{T_o} = 1 + \frac{2(M_o^2 - 1)(\gamma M_o^2 + 1)(\gamma - 1)}{M_o^2(\gamma + 1)^2} \quad (4.11)$$

$$\frac{u}{u_o} = 1 - \frac{2(1 - b\rho_o)(M_o^2 - 1)}{(\gamma + 1)M_o^2} \quad (4.12)$$

Dans le cas d'un choc fort, i.e., $M_o \gg 1$, les relations précédentes se simplifient

$$\frac{\rho}{\rho_o} = \frac{\gamma + 1}{\gamma - 1 + 2b\rho_o} \quad (4.13)$$

$$\frac{p}{p_o} = \frac{2\gamma}{\gamma + 1} M_o^2 \quad (4.14)$$

$$\frac{T}{T_o} = \frac{2\gamma M_o^2(\gamma - 1)}{(\gamma + 1)^2} \quad (4.15)$$

$$\frac{u}{u_o} = \frac{\gamma - 1 + 2b\rho_o}{\gamma + 1} \quad (4.16)$$

Les rapports de pression, de masse volumique, de température et de vitesse sont représentés sur la Figure 4.3 en fonction du nombre de Mach amont. On constate que la pression et la température ne varient pas en fonction du covolume. Cependant, la masse volumique diminue avec l'augmentation du terme $2b\rho_o$ (cf Eq 4.13), et la vitesse augmente. Et ces différences deviennent d'autant plus importantes que le nombre de Mach augmente.

4.2.3 Relations de Chapman-Jouguet

Les relations de Chapman-Jouguet sont revisitées pour l'équation d'état Noble-Abel. Les équations de conservation demeurent inchangées et les détails de calcul sont fournis dans l'Annexe C. La solution exacte du modèle CJ dans le cas NA s'écrit de la manière

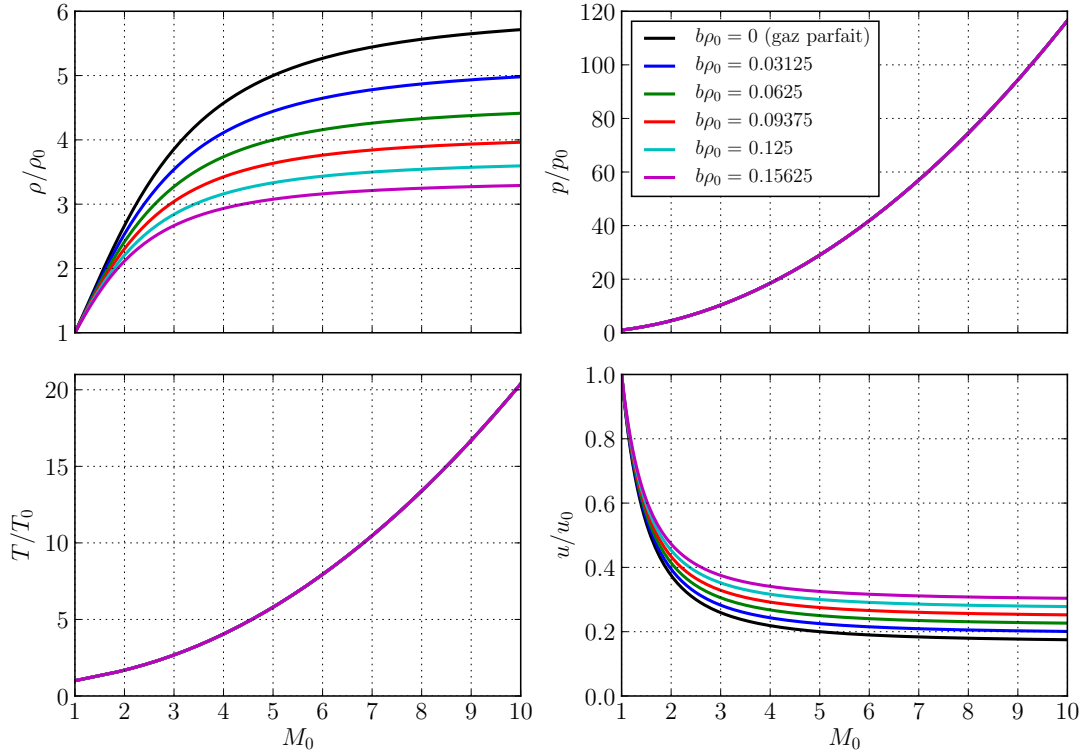


FIGURE 4.3 – Variations de ρ/ρ_0 , p/p_0 , T/T_0 , et u/u_0 à travers un choc en fonction du nombre de mach M_0 amont, pour $\gamma = 1.4$ et différentes valeurs de $b\rho_0$.

suivante :

$$\frac{\rho_0}{\rho_{CJ}} = \frac{\gamma + b\rho_0}{\gamma + 1} + \frac{1 + b\rho_0}{(\gamma + 1)M_{CJ}^2} \quad (4.17)$$

$$\frac{p_{CJ}}{p_0} = \frac{1 + \gamma M_{CJ}^2}{\gamma + 1} \quad (4.18)$$

$$\frac{T_{CJ}}{T_0} = \left(\frac{1 + \gamma M_{CJ}^2}{(\gamma + 1)M_{CJ}} \right)^2 \quad (4.19)$$

Le nombre de Mach CJ s'exprime :

$$M_{CJ} = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\gamma^2 - 1}{\gamma} q' \right)^{1/2} + \left(\frac{\gamma^2 - 1}{\gamma} q' + 4 \right)^{1/2} \right] \quad (4.20)$$

Cette précédente solution est calculée à partir de la droite de Rayleigh et la courbe de Crussard en utilisant les variables adimensionnées issues des relations approchées. Ces variables sont $y = p/p_0$, $x = \rho/\rho_0$, $q' = 2q\rho_0/(p_0(1 - b\rho_0))$ et $k = (\gamma + 1)/(\gamma - 1)$. La droite de Rayleigh s'écrit :

$$y = 1 - \gamma M_0^2 (x - 1) \quad (4.21)$$

De la même manière, la courbe Crussard se déduit :

$$y = \frac{q' + k - x}{kx - 1} \quad (4.22)$$

où $M_{\text{CJ}} = D_{\text{CJ}}/c_0$ le nombre de Mach dans les gaz frais lié au repère du choc. La vitesse du son est définie par la relation C.28. La solution approchée à travers l'hypothèse d'un choc fort permet d'obtenir les relations suivantes :

$$\frac{\rho_{\text{CJ}}}{\rho_0} \approx \frac{\gamma + 1}{\gamma + b\rho_0} \quad (4.23)$$

$$\frac{p_{\text{CJ}}}{p_0} \approx \frac{\gamma}{\gamma + 1} M_{\text{CJ}}^2 \quad (4.24)$$

$$\frac{T_{\text{CJ}}}{T_0} \approx \left(\frac{\gamma}{\gamma + 1} \right)^2 M_{\text{CJ}}^2 \quad (4.25)$$

où

$$c_{\text{CJ}} \approx \frac{(\gamma + b\rho_0)D_{\text{CJ}}}{\gamma + 1} \quad (4.26)$$

$$M_{\text{CJ}} \approx \sqrt{\frac{2\rho_0(\gamma^2 - 1)q}{\gamma p_0(1 - b\rho_0)}} \quad (4.27)$$

$$D_{\text{CJ}} \approx \sqrt{\frac{2q(\gamma^2 - 1)^2}{1 - b\rho_0}} \quad (4.28)$$

Les corrections apportées au modèle CJ par l'équation d'état Noble-Abel se font via le terme $b\rho_0$. Les variables impactées sont la masse volumique ρ_{CJ} , la vitesse matérielle u_{CJ} , la vitesse du son c_{CJ} et la vitesse du front de détonation D_{CJ} .

Il convient alors d'étudier la solution stationnaire ZND et la propagation de la détonation idéale afin d'évaluer l'influence de l'équation d'état sur les instabilités de la détonation. Une étude comparative est effectuée pour un mélange réactif à des conditions initiales de pression élevée.

4.3 Propriétés du mélange

Les conditions initiales sont $p_0 = 5$ MPa et $T_0 = 300$ K. La chaleur de réaction chimique adimensionnée est $q/RT_0 = 50$ et le rapport des capacités calorifiques vaut $\gamma = 1.2$. Pour rappel, $R = R_u/\bar{W}$ (Eq. 2.11). Le co-volume, $b = 9.38 \times 10^{-4}$ m³/kg d'un mélange hydrogène oxygène à la stœchiométrie a été ajusté afin obtenir la vitesse de détonation expérimentale $D_{\text{NA}} = 3150$ m/s [208]. La vitesse de détonation obtenue avec l'équation

d'état GP est de 2.25% inférieure à la valeur expérimentale, à savoir $D_{GP} = 3079$ m/s. Le facteur pré-exponentiel de la loi d'Arrhenius est $k = 1.1 \times 10^9$ s⁻¹ pour l'équation d'état GP et $k = 1.25 \times 10^9$ s⁻¹ pour l'équation d'état NA. Cette légère variation dans ce facteur est volontairement introduite afin d'assurer une demi-longueur de réaction $l_{1/2}$ similaire pour les deux équations d'état (voir sous-section suivante). Finalement, la masse molaire utilisée dans cette étude est commune pour les deux EOS valant ainsi $W = 12$ g/mole. L'énergie d'activation réduite du mélange est de $E_a/RT_0 = 20$. Ce choix de paramètres permet d'obtenir une détonation stable située en-dessous de la courbe de la limite de stabilité [40], i.e., pas d'instabilités longitudinales dans le cas 1-D dans le cas GP. Les instabilités 2-D et la structure cellulaire associée restent néanmoins présentes.

4.4 Solution stationnaire ZND

La structure de l'onde de détonation peut être obtenue dans un cas stationnaire et dans le repère lié au front à travers le modèle ZND. Les profils de masse volumique, pression, température et nombre de Mach sont représentés dans la Figure 4.4 où les deux EOS peuvent être comparées. La demi-longueur de réaction mesurée à travers le profil de fraction massique du réactif $Y_f(l_{1/2}) = 0.5$ est de $l_{1/2} = 6.71$ μm dans les deux cas. Les distances sont normalisées par cette longueur. La pression et la température à l'état von Neumann ne sont pas affectées par l'équation d'état. En revanche, la masse volumique est de 17.5% inférieure dans le cas NA par rapport au cas GP. Ce résultat confirme les observations théoriques de l'état vN présentées dans la section 4.2.2 où ρ_{vN} est modifiée par la présence du terme $b\rho_0$ (cf. Eq 4.9 et 4.13). Une synthèse des propriétés CJ et vN relatives aux deux cas est présentée dans le tableau 4.1.

TABLE 4.1 – Synthèse des propriétés à l'état CJ et vN

	γ	D_{CJ} [m/s]	p_{vN}/p_o	ρ_{vN}/ρ_o	T_{vN}/T_o	p_{CJ}/p_o	ρ_{CJ}/ρ_o	T_{CJ}/T_o
Gaz parfait	1.2	3079	41	8.70	4.7	21.5	1.79	11.8
Noble-Abel	1.2	3150	41	7.43	4.7	21.5	1.76	11.8

4.5 Détonation 2-D

La structure bidimensionnelle de la détonation est obtenue à travers des simulations numériques réalisées avec le code de calcul RESIDENT. Cette étude nous permettra de

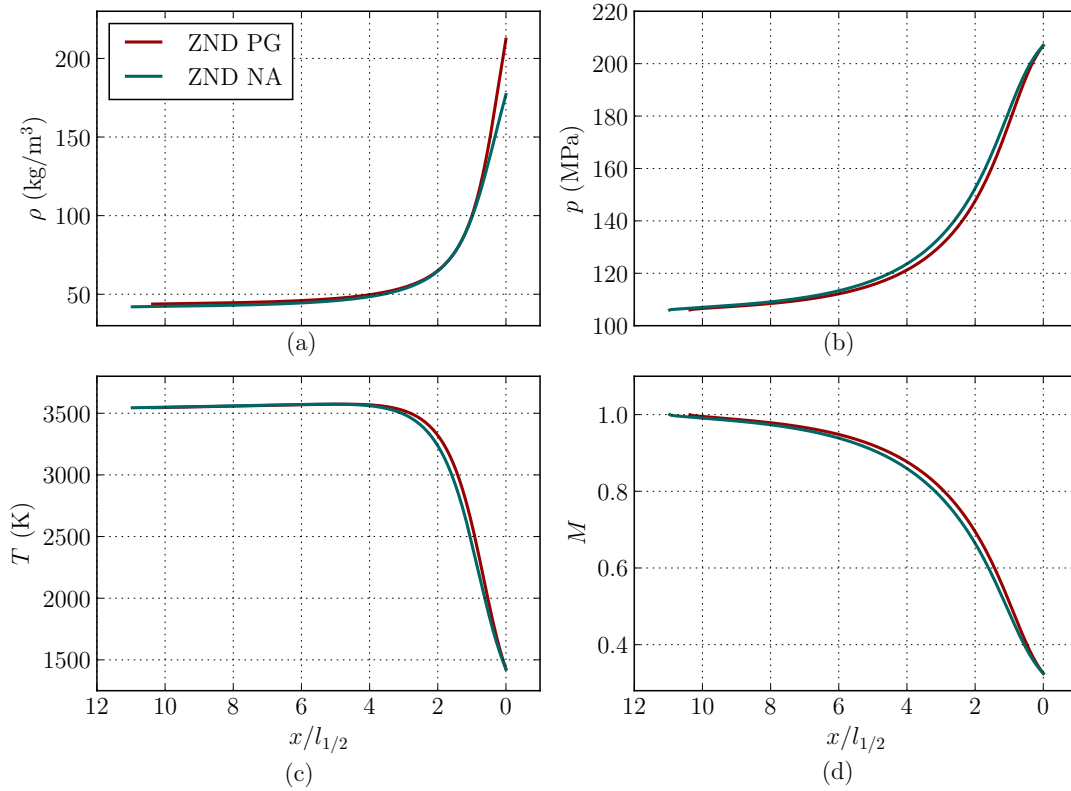


FIGURE 4.4 – Comparaison des profils ZND pour GP et NA. Masse volumique, pression, température et Mach. Le co-volume, $b = 9.38 \times 10^{-4} \text{ m}^3/\text{kg}$ est ajusté pour obtenir la vitesse de détonation expérimentale D_{CJ} pour un mélange réactif $\text{H}_2 - \text{O}_2$ à la stœchiométrie [208].

comparer les structures cellulaires obtenues avec ces deux EOS. Les simulations ont été effectuées sur le supercalculateur OCCIGEN du centre de calcul CINES, composé de 50 544 cœurs Haswell E5-2690V3@2.6GHz et 35 280 cœurs Broadwell E5-2690V4@2.6GHz d’une puissance théorique maximum de 3.5 Pflops/s. Le coût total des simulations est estimé à 0.5 Million d’heures CPUs.

Le domaine de calcul est bidimensionnel avec une longueur de $L_x = 300 l_{1/2}$ et une largeur de $L_y = 150 l_{1/2}$. L’emploi de la méthode de recyclage d’une partie du domaine permet de réduire significativement sa longueur. Le domaine de calcul est ainsi beaucoup plus petit que la distance de propagation, qui peut atteindre des milliers de demi-longueur de réaction $l_{1/2}$. Les conditions aux limites en amont et en aval sont des conditions d’absorption tandis que les limites supérieure et inférieure ont des conditions de réflexion par symétrie. La taille de la maille de calcul est de $\Delta x = l_{1/2}/(20 \text{ pts})$. Le nombre de mailles est 1.125 millions. Le calcul est initialisé en déposant localement une quantité énergétique importante dans un mélange constitué de réactifs. Une onde de souffle est formée dont l’amplitude décroît jusqu’à atteindre une phase stationnaire où une onde de détonation autonome est obtenue.

4.5.1 Dynamique du front de détonation

La Figure 4.5(a) présente l'évolution de la vitesse horizontale instantanée de détonation en fonction de la distance parcourue par le front pour les deux équations d'état. La distance est normalisée par la demi-longueur de réaction $l_{1/2}$ tandis que la vitesse est normalisée par D_{CJ} . Ces vitesses sont obtenues en faisant un relevé de la position x_s du choc précurseur à chaque instant dans la simulation proche de la paroi inférieure $y \sim 0^+$ puis en calculant sa dérivée. À partir de $500 l_{1/2}$, le front de détonation a une vitesse de détonation, qui est en moyenne stationnaire et égale à D_{CJ} .

Le comportement global des vitesses instantanées (Figure 4.5) obtenues pour les deux équations d'état est très similaire. Les pics observés proviennent de la structure cellulaire de la détonation. En effet, une collision de points triples, ainsi que les ondes de choc transverses vont former des disques de Mach. Leur vitesse va ensuite décroître due à la présence de gradients et de la courbure du front, jusqu'à ce que ces fronts deviennent des chocs incidents, dont la vitesse est inférieure à D_{CJ} . Un nouveau cycle va ensuite se former, après une nouvelle collision de points triples.

L'amplitude des oscillations de vitesse de détonation est comprise entre 0.7 et $1.6 D_{CJ}$ pour GP alors qu'elle est comprise entre 0.8 et $1.8 D_{CJ}$ pour NA. La fonction de densité de probabilité (pdf) de la vitesse de détonation est représentée sur la Figure 4.5b. Seul un point sur cinq est représenté. La pdf pour les deux EOS est globalement la même. L'occurrence la plus probable est aux alentours de 0.9 . Les légères différences se situent aux extrema : le minimum est plus faible pour PG (0.7 au lieu de 0.75 pour NA) et le maximum est plus élevé pour NA (1.45 au lieu de 1.4 pour GP).

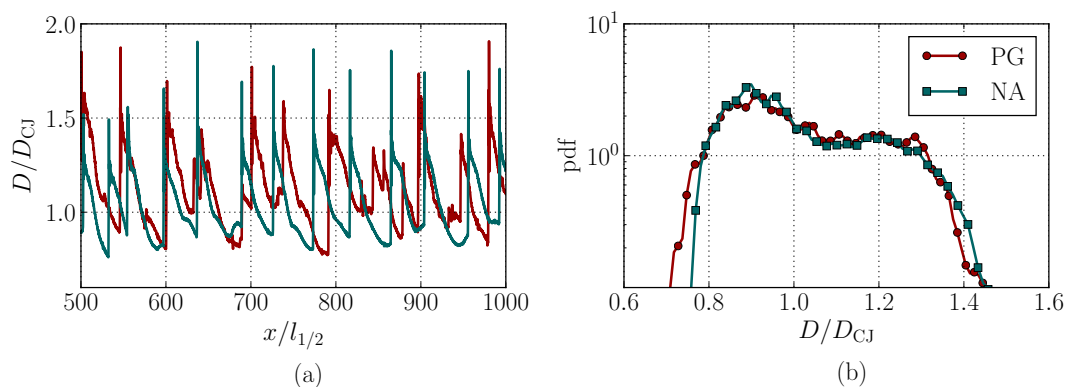


FIGURE 4.5 – (a) : Vitesse de détonation en fonction de la distance parcourue normalisée par $l_{1/2}$. (b) : Fonction de densité de probabilité (pdf) de la vitesse. Comparaison entre les deux équations d'état GP et NA. Les vitesses sont normalisées par D_{CJ} .

4.5.2 Comparaison des profils moyens

La détonation adopte naturellement un comportement instable avec des oscillations locales importantes de la vitesse de détonation. Un processus de moyenne de Favre [47, 231] a été mis en place au cours de la simulation. Le champ 2-D est moyenné de la façon suivante [84-86] :

$$\bar{G} = \frac{1}{H} \int_0^H \lim_{T \rightarrow \infty} \left\{ \frac{1}{T} (G(x - x_s(y, t), y, t) dt) \right\} dy \quad (4.29)$$

avec $x_s(y, t)$ la position instantanée du front de choc et H la hauteur du canal. Le processus de moyenne s'effectue ainsi en aval du front de détonation. Nous allons nous appuyer sur cette méthode pour apprécier les différences entre les deux EOS, et leur écart par rapport à la solution ZND.

La Figure 4.6 présente l'évolution des variables thermodynamiques des simulations numériques, qui sont comparées au modèle ZND pour chacune des EOS. L'évolution de la masse volumique moyenne $\bar{\rho}$, la pression moyenne \bar{p} , la température moyenne \tilde{T} et le nombre de Mach moyen $\tilde{M} = (D_{CJ} - \tilde{u})/(\gamma\bar{\rho}/\bar{p})^{1/2}$ sont respectivement présentés sur les Figures 4.6(a), 4.6(b), 4.6(c), 4.6(d). Seul un point sur cinq est représenté. Afin d'éviter les effets de bords, 3 mailles sur la direction y aux bords supérieur et inférieur du canal sont exclues dans l'intégrale précédente 4.29. Les valeurs à l'état CJ sont confondues. Les valeurs post-choc à l'état vN sont également restituées par les simulations numériques. On peut constater que les fluctuations des variables thermodynamiques ont tendances à étaler la zone de réaction, retardant le dégagement d'énergie dans l'écoulement. Le plan sonique est ainsi atteint à 15 $l_{1/2}$ dans les simulations numériques au lieu des 11 $l_{1/2}$ du modèle ZND.

4.6 Structure cellulaire

La structure cellulaire de la Figure 4.7 est obtenue par le maximum des pressions pour les deux équations d'état avec (a) Noble-Abel et (b) gaz parfait. Les distances sont normalisées par la demi-longueur de réaction. Elle a été obtenue après que la détonation ait parcouru 1000 $l_{1/2}$, afin de s'affranchir des conditions initiales. Dans notre configuration, la détonation est multi-cellulaire et forme un réseau de plusieurs cellules, qui est indépendant de la présence des parois et de la dimension transverse H du canal. La distribution des tailles de cellules est de 15 $l_{1/2} < \lambda_{GP} < 22 l_{1/2}$ et de 18 $l_{1/2} < \lambda_{NA} < 25 l_{1/2}$. Bien que la taille moyenne soit la même ($\sim 20 l_{1/2}$), les cellules pour GP sont plus irrégulières que

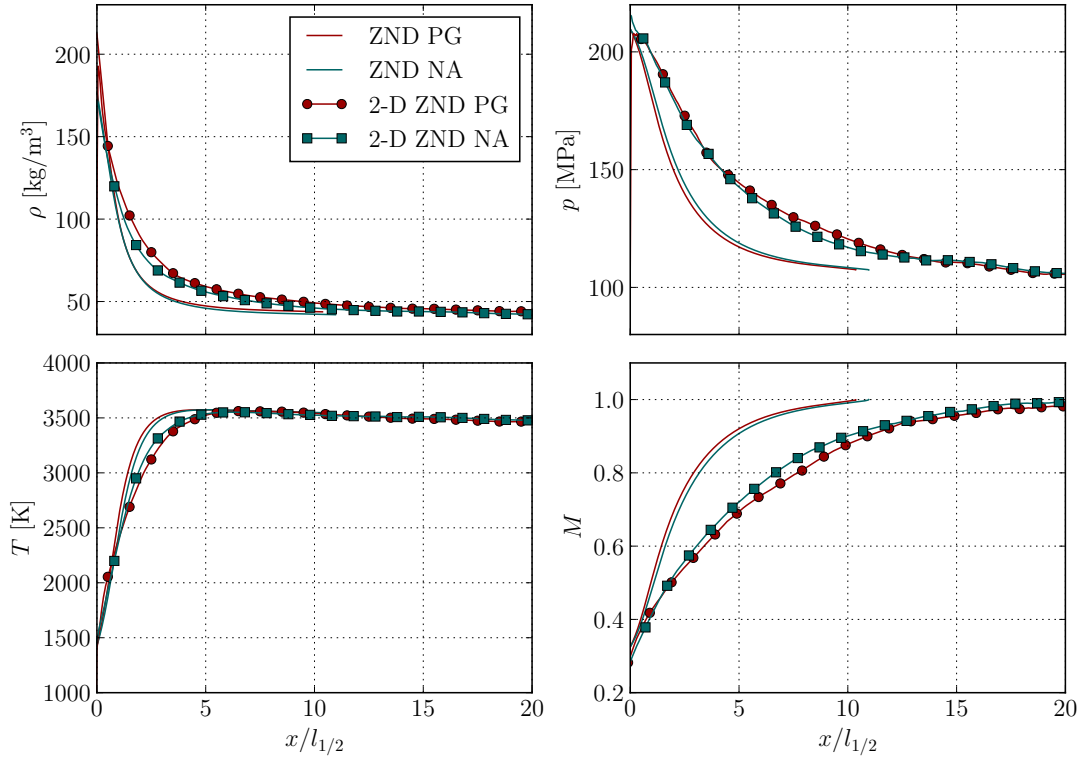


FIGURE 4.6 – Évolution du profil moyen de masse volumique (a), de pression (b), de température et du nombre de Mach dans le repère du choc (d) en fonction de la distance au choc normalisée par la demi-longueur de réaction $l_{1/2}$ (symboles). Comparaison avec les résultats du modèle ZND (lignes).

celles de NA.

Une analyse plus approfondie de la formation des cellules (Figure 4.7) permet de mettre en lumière un mécanisme supplémentaire contribuant à la formation des points triples. La Figure 4.8 présente un agrandissement de la structure cellulaire pour les deux EOS. Les cellules sont plus irrégulières dans le cas GP (Figure 4.8). Les flèches en bleu montrent la trajectoire d'une perturbation (1.). Initialement issue de la collision de deux points triples en (1.), elle s'affaiblit (2.) lors de sa propagation dans la cellule, puis se renforce à la suite de chaque interaction avec des points triples, (3., 4. et 5.), pour finalement devenir un point triple en (5.).

Ainsi, le mécanisme d'amplification des instabilités est lié à leurs interactions successives avec les points triples. Cependant, il reste à déterminer l'origine de cette perturbation initiale, ce qui va faire l'objet de la sous-section suivante.

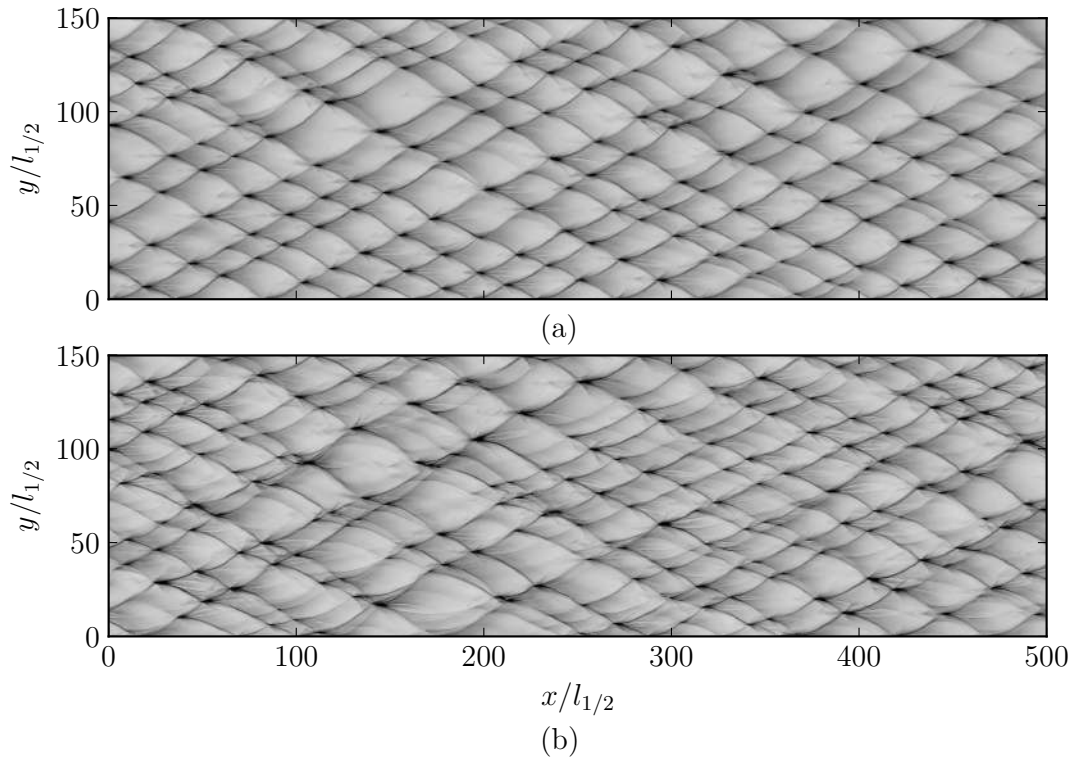


FIGURE 4.7 – Historique des maxima de pression illustrant la structure cellulaire de détonation pour les deux équations d'état (a) : Noble-Abel (b) : Gaz parfait. Les distances sont normalisées avec la demi-longueur de réaction $l_{1/2}$. La pression initiale est de $p_0 = 50$ bar.

4.7 Origine de l'instabilité

Bien que le rapport des capacités calorifiques γ , la demi-longueur de réaction $l_{1/2}$, l'énergie d'activation réduite E_a/RT_0 , la chaleur de réaction réduite q/RT_0 soient les mêmes, la régularité de la structure cellulaire est différente. Afin d'examiner ce processus avec plus de détails, des simulations numériques ont été réalisées en utilisant un canal de largeur $L_y = 0.8\lambda$ pour les deux EOS. Cela permet de rendre la détonation marginale et d'isoler ainsi une seule longueur d'onde d'instabilité. La Figure 4.9 présente une séquence de champs de température adimensionnée T/T_0 , des Schlieren numériques de masse volumique et de pression pour les deux EOS (Figure 4.9 haut : NA, Figure 4.9 bas : GP).

La séquence pour NA présente un comportement classique d'une détonation marginale. Le Schlieren permet d'identifier les éléments usuels qui composent un front de détonation. Il est composé d'un front de choc incident (**i**) et d'un disque de Mach (**m**). À $t_{NA} = 101.53 \mu s$, l'onde de choc transverse s'est réfléchi sur la paroi supérieure. Un disque de Mach (**m**) s'est formé dans la partie supérieure du front et est relié au point triple (**a**) au niveau de $y/l_{1/2} = 7$. Le choc incident occupe la partie inférieure jusqu'à la paroi. Un choc transverse

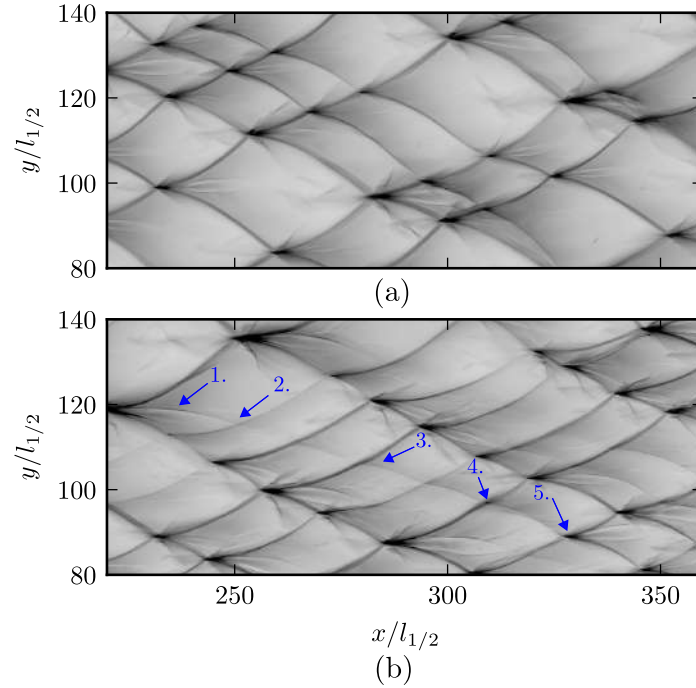


FIGURE 4.8 – Agrandissement de la structure cellulaire de détonation dans la portion $x/l_{1/2} \in [200, 360]$; $y/l_{1/2} \in [80, 140]$ pour les deux équations d'état (a) : Noble-Abel (b) : Gaz parfait. Les distances sont normalisées avec la demi-longueur de réaction $l_{1/2}$. Les conditions initiales sont : $p_0 = 50$ bar, $T_0 = 300$ K.

relie les deux points triples (a) et (b), dans une configuration de double réflexion de Mach [204]. Le disque de Mach est caractérisé par une zone de réaction moins épaisse que celle en aval du choc incident comme l'atteste le champ de température. Une ligne de glissement (s) sépare les gaz brûlés en aval du disque de Mach des gaz brûlés en aval du choc incident. Cette ligne connaît son origine au point triple (a) et s'enroule au niveau de la paroi supérieure. Dans le contexte d'une réflexion irrégulière de Mach, pour des chocs forts, la pression de stagnation est suffisamment élevée pour que l'écoulement forme un jet, dirigé vers le disque de Mach. Cet effet hydrodynamique est certainement amplifié par le taux de dégagement de chaleur derrière le disque de Mach [226, 232].

Une seconde ligne de glissement (r) visible derrière le front ($x/l_{1/2}=5, y/l_{1/2}=10$) sépare une poche de gaz imbrûlés. Le segment (b-c) forme un choc qui interagit avec la ligne de glissement (s). L'instantané suivant à $t_{NA} = 101.55 \mu\text{s}$ montre le déplacement du point triple vers la paroi inférieure. Le disque de Mach est devenu plus faible avec une zone de réaction plus étendue que l'instant précédent. À cet instant, l'onde transverse impacte la paroi à $x/l_{1/2} = 0$, interagissant avec le vortex formé par le jet d'un cycle antérieur. À $t_{NA} = 101.56 \mu\text{s}$, le point triple a atteint la paroi inférieure. L'onde transverse a changé de direction, allant maintenant vers la paroi supérieure. Les points triples (b,c) et la ligne de glissement se sont ainsi détachés du front et sont ensuite convectés en aval. La structure

tourbillonnaire au niveau de la paroi supérieure est également convectée en aval du front de choc incident. Finalement, la détonation connaît un nouveau cycle. On constate également qu'à l'instant $t_{NA} = 101.59 \mu\text{s}$, la structure du front est inversée par rapport à celle de l'instant $t_{NA} = 101.53 \mu\text{s}$.

La phénoménologie est la même dans le cas GP. On peut cependant observer que le jet qui est formé sur la paroi supérieure à l'instant $t_{GP} = 109.12 \mu\text{s}$ rattrape le disque de Mach et va le déformer. Le disque de Mach va alors présenter une singularité au niveau de sa courbure. Ce changement local de la courbure du disque de Mach est à la source de la formation d'un nœud noté (k_2) sur le front, avec une singularité dans la courbure. Il va ensuite interagir avec la paroi. On peut constater que les ondes de choc associés à ce point triple diminuent en intensité, pour se transformer en faibles ondes de pression à $t_{GP} = 109.21 \mu\text{s}$ (gradient très faible sur le Schlieren de pression), ne laissant plus qu'une ligne de glissement (voir Figure 4.9- Schlieren de densité). De façon similaire, la singularité (k_1) issue d'une interaction antérieure dont on distingue principalement qu'une ligne de glissement sur le schlieren de densité, remonte le long du front vers la paroi supérieure. Il va ensuite interagir avec le point triple, comme l'atteste les séquences suivantes $t_{GP} = 109.15 - 109.16 \mu\text{s}$. En interagissant avec le point triple (a) à l'instant $t_{GP} = 109.15 \mu\text{s}$, la singularité va se renforcer et devenir un point triple comme sur la Figure 4.9 à l'instant $t_{GP} = 109.16 \mu\text{s}$. Il va continuer sa propagation vers la paroi supérieure (Figure 4.9 à $t_{GP} = 109.21 \mu\text{s}$). À $t_{GP} = 109.21 \mu\text{s}$, on peut constater que la ligne de glissement associée à (k_1) va venir perturber l'onde transverse du point triple (a) qui est en train de remonter vers la paroi supérieure.

En résumé, l'interaction du jet avec le disque de Mach, qui provient de la collision de points triples ou de la collision de points triples avec la paroi semble être le mécanisme qui est à l'origine de la bifurcation du front et de la formation de nouveaux points triples.

Les observations de la bifurcation du disque de Mach sous l'action de ce jet ont été rapportées par Sharpe [233]. De cet impact de jet sur le front de choc va s'ensuivre une structure tourbillonnaire. Il est difficile d'après les simulations numériques présentes de savoir si ce sont les interactions onde de choc-vortex qui seraient responsables de la genèse de ce point triple, comme l'a conclu Clavin [229] à partir d'une analyse linéaire dans la limite newtonienne des chocs forts. Radulescu et al. [228] ont également indiqué que ce phénomène de bifurcation faisait suite à la réflexion d'un point triple inerte, et que les paramètres influents sont l'angle d'incidence, l'intensité du choc et la valeur du ratio des capacités calorifiques. Des simulations numériques sur l'incidence d'un choc inerte sur une rampe ont montré qu'au-delà d'un angle d'inclinaison de 20° , un nombre de Mach ~ 6 et $\gamma = 1.2$, des bifurcations surgissent au niveau du disque de Mach menant à la formation d'un

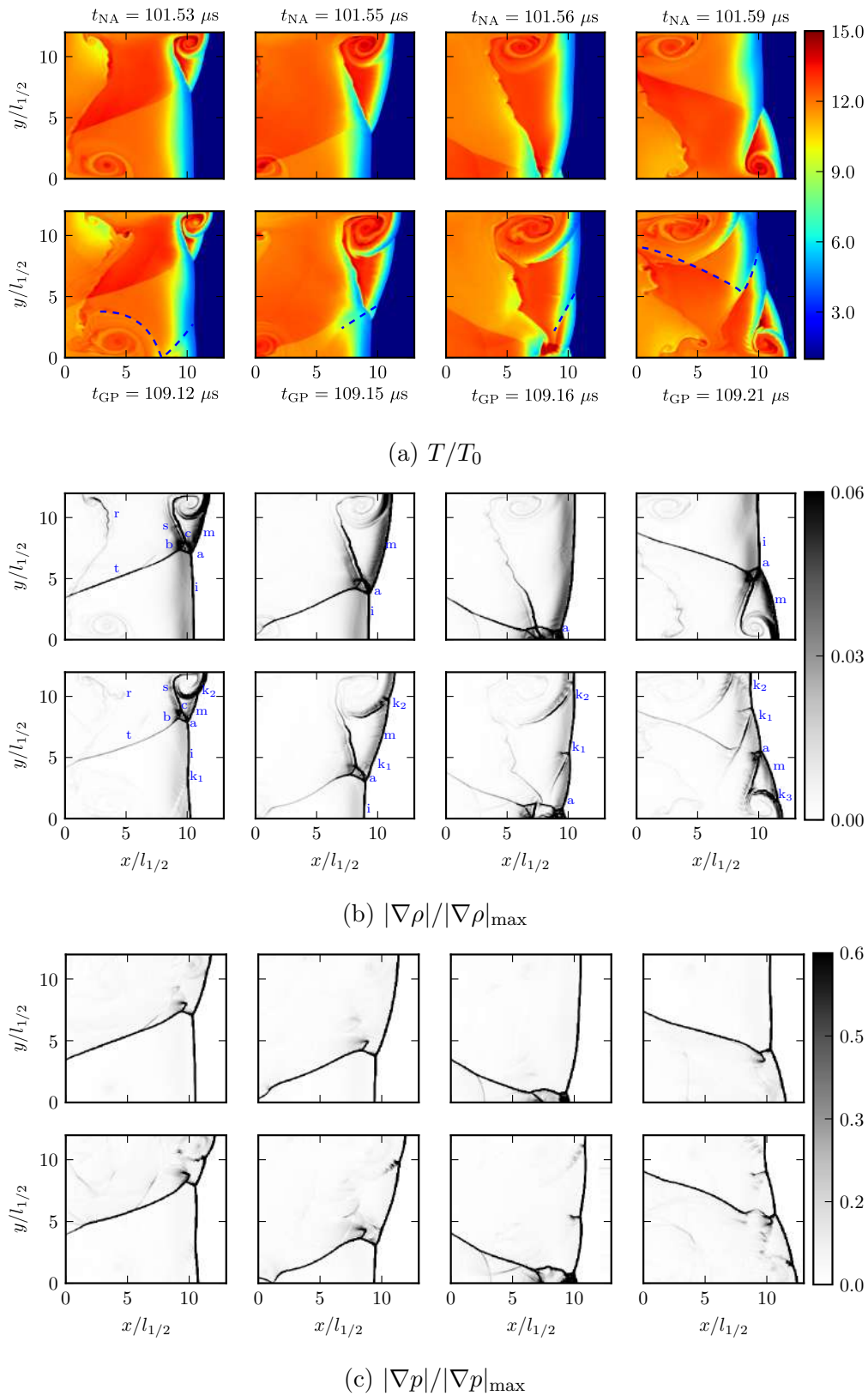


FIGURE 4.9 – Séquence d'images des champs de température normalisée (a), Schlieren de masse volumique (b) et de pression (c) obtenus pour une détonation marginale. Comparaison entre les simulations Noble-Abel (haut) et Gaz parfait (bas).

second point triple. Cet angle est bien inférieur à celui observé dans les détonations [47] ($\sim 34^\circ$). La formation de ces bifurcations sont proches de celles décrites dans le cadre de notre étude. L'influence du rapport des capacités calorifiques sur la formation de ces points triples a été intensément étudié par Lau-Chapdelaine [234].

Mach et Radulescu [227] ont montré que ces bifurcations étaient présentes en fonction du nombre de Mach du choc et de l'angle d'incidence de la rampe, et ce pour différents ratios des capacités calorifiques. Une étude paramétrique extensive de Lau-Chapdelaine [235] a montré que pour un angle proche de celui observé dans les détonations, un diagramme de bifurcation du nombre de Mach en fonction du coefficient polytropique pouvait être construit. Ainsi, le nombre de Mach pour lequel une bifurcation est observée, diminue avec le coefficient polytropique. Ceci a été confirmé par un ensemble d'expérimentations dans des tubes à choc [235]. Mach et Radulescu [227] ont corroboré l'apparition de ces bifurcations avec la régularité de la structure cellulaire en s'appuyant sur une importante base expérimentale. Un résumé de cette classification est présenté dans le Tableau 4.2. Ici, γ est le coefficient polytropique post-choc à l'état vN. Les détonations dont le coef-

TABLE 4.2 – Propension de la réflexion d'un point triple à développer une bifurcation, pour un angle de 34° . Adapté de Mach et Radulescu [226] et Lau-Chapdelaine [234].

γ	Bifurcation	Structure cellulaire
≤ 1.2	Oui	Irrégulière
1.2/1.3	Oui	Intermédiaire
≥ 1.41	Non	Régulière

ficient polytropique est inférieur à $\gamma \leq 1.3$ adoptent une structure cellulaire irrégulière. En revanche, les structures cellulaires sont relativement modérément instables pour un coefficient polytropique compris entre $\gamma = 1.2$ et $\gamma = 1.3$. Au delà de $\gamma = 1.4$, la détonation devient régulière et le disque de Mach ne génère plus de bifurcation. Il est à noter que ces détonations sont relatives à des mélanges gazeux qui peuvent être décrits par l'EOS des gaz parfaits. Or Mach et Radulescu indiquent bien que c'est bien la compressibilité du gaz qui est importante. Cependant, dans le cas des gaz parfaits, le coefficient isentropique et le rapport entre les capacités calorifiques à pression et à volume constant se confondent. En revanche, ce n'est plus le cas dans le cas de l'EOS Noble-Abel. En effet, l'expression du coefficient de compressibilité isentropique est :

$$\chi_s = \frac{\rho}{p} \left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_s \quad (4.30)$$

Les coefficients isentropiques sont évalués à l'état post-choc vN et deviennent ainsi pour

chaque EOS

$$\chi_{s,PG} = \gamma \quad ; \quad \chi_{s,NA} = \frac{\gamma}{1 - b\rho_{vN}} \quad (4.31)$$

Pour un gaz parfait, le coefficient de compressibilité isentropique vaut $\chi_{s,PG} = \gamma = 1.2$. En revanche, le rapport $b\rho_{vN}$ intervient dans l'expression du coefficient de compressibilité isentropique, qui vaut alors $\chi_{s,NA} = 1.42$. Ce résultat montre une augmentation importante du coefficient isentropique au passage du front de détonation. Ainsi, selon la classification de Mach et Radulescu [227] et Lau-Chapdelaine [234] (voir Tableau 4.2), la structure irrégulière deviendra régulière, si le coefficient de compression isentropique est au-dessus de 1.4. Ce critère permet ainsi d'expliquer la régularisation de la structure cellulaire, quand l'EOS est changé.

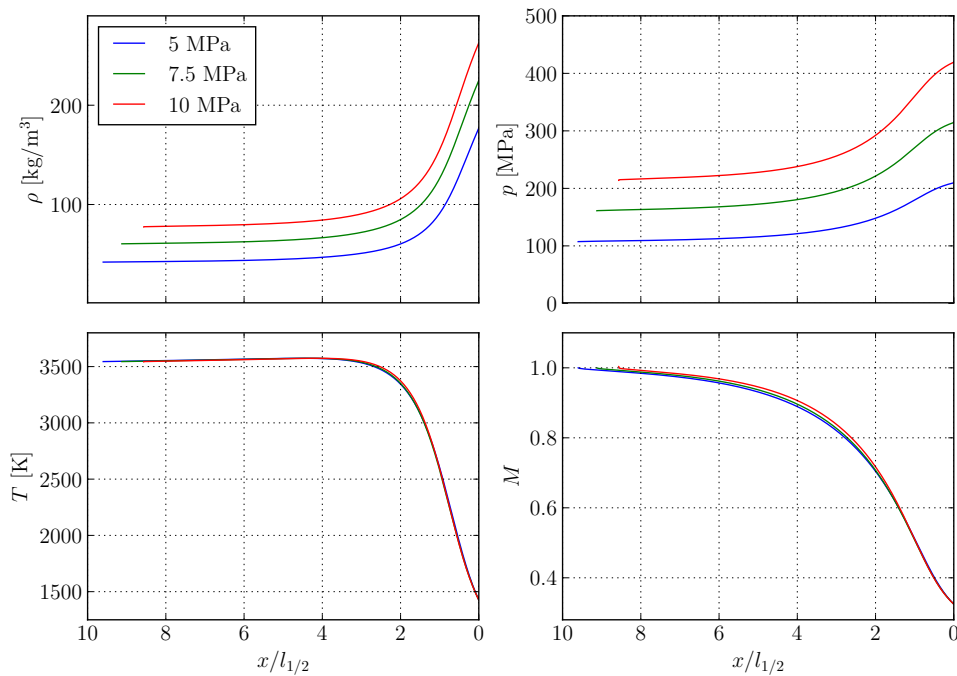


FIGURE 4.10 – Profils de masse volumique, de pression, de température et du nombre de Mach pour trois pressions initiales $p_0 = 5$ MPa, 7.5 MPa et 10 MPa. Les distances sont normalisées par la demi-longueur de réaction $l_{1/2}$ de chaque cas.

Afin de confirmer ce résultat, des simulations numériques supplémentaires ont été effectuées. Le coefficient de compression isentropique $\chi_{s,NA}$ étant une fonction croissante du produit $b\rho_{vN}$, une augmentation du co-volume engendrerait une structure cellulaire plus régulière. Des simulations numériques ont ainsi été conduites pour deux pressions initiales $p_0 = 7.5$ MPa et $p_0 = 10$ MPa. Les co-volumes résultants sont respectivement : $b_{7.5} = 1.305 \times 10^{-3} \text{ m}^3\text{kg}$ et $b_{10} = 1.45 \times 10^{-3} \text{ m}^3\text{kg}$ pour des vitesses $D_{CJ,7.5} = 3220 \text{ m/s}$ et $D_{CJ,10} = 3297 \text{ m/s}$. Les demi-longueurs de réaction calculées à partir de la solution stationnaire ZND sont $l^{1/2,7.5} = 2.5 \text{ }\mu\text{m}$ et $l_{1/2,10} = 2.0 \text{ }\mu\text{m}$. Ces valeurs sont tirées de Schmidt et Butler [208]. Les profils ZND pour les différentes conditions initiales de pression

sont représentés sur la Figure 4.10. Les pressions augmentent avec la pression initiale. Cependant, les températures post-choc vN sont les mêmes dans notre étude.

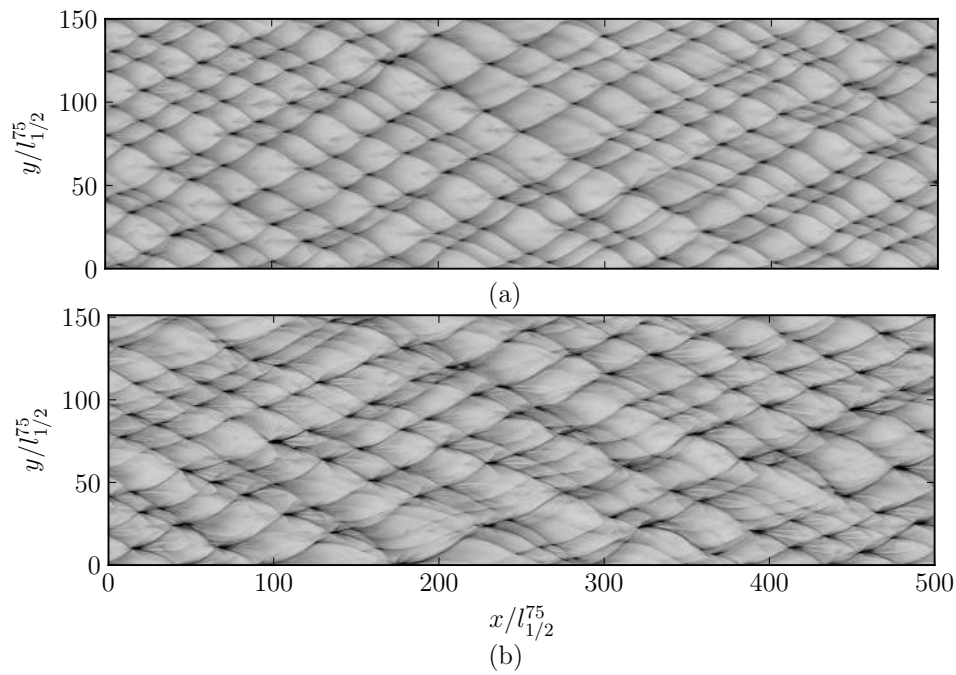


FIGURE 4.11 – Structure cellulaire de détonation pour deux EOS (a) : Noble-Abel (b) : Gaz parfait. La pression initiale est de $p_0 = 7.5$ MPa, le coefficient isentropique étant de $\chi_{s,7.5} = 1.7$.

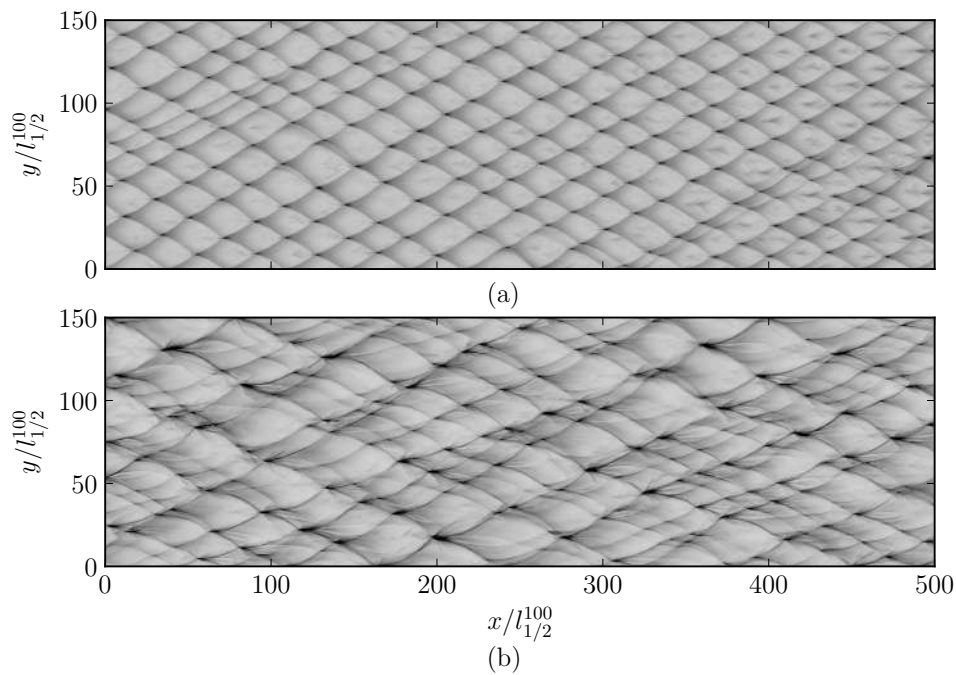


FIGURE 4.12 – Structure cellulaire de détonation pour deux EOS (a) : Noble-Abel (b) : Gaz parfait. La pression initiale est de $p_0 = 10$ MPa, le coefficient isentropique étant de $\chi^{s,10} = 1.93$.

Les structures cellulaires résultantes sont présentées sur les Figures 4.11 et 4.12. Les coefficients isentropiques sont respectivement de $\chi_{s,7.5} = 1.7$ et $\chi_{s,10} = 1.9$. La structure cellulaire obtenue par GP reste instable quelque soit la pression initiale.

Pour le cas NA, la structure cellulaire devient plus régulière quand on augmente la pression initiale. La température post-choc T_{vN} étant la même dans le cadre de nos simulations, la régularité de la structure cellulaire ne peut provenir du seul critère E_a/RT_{vN} , ici constant. Ainsi, la structure cellulaire devient d'autant plus régulière que le coefficient isentropique augmente, confirmant ainsi l'utilisation du coefficient isentropique comme critère pour estimer la régularité de la structure cellulaire. De plus la taille moyenne des cellules diminue avec $l_{1/2}$. Le ratio $\mathcal{A} = \lambda/l_{1/2}$ est constant avec 18.2, 19.59, 20.6 pour les pressions de 5, 7.5 et 10 MPa.

4.8 Synthèse partielle

L'équation d'état des gaz parfaits ne permet plus de décrire les détonations à haute pression, configurations qui peuvent être présentes dans des problématiques de stockage de combustible à haute pression ou de propulsion par détonation. Ainsi, nous avons examiné l'influence de l'équation d'état sur la régularité de la structure cellulaire de la détonation, qui conditionne des règles empiriques de dimensionnement.

Les résultats de simulations numériques obtenues avec les deux EOS des gaz parfaits et de Noble-Abel ont été comparées, tout en conservant les mêmes paramètres de cinétique chimique globale et de chaleur de réaction.

Les simulations numériques ont ainsi montré que ce n'est pas l'interaction onde de choc-vortex qui est responsable de la création d'un nouveau point triple. En effet, c'est l'interaction d'une ligne de glissement avec un ensemble de points triples (et tout le complexe d'ondes de choc qui lui est associé) qui en est à l'origine. Cette ligne de glissement provient de la séquence suivante : (i) Une collision de points triples ; (ii) création d'un jet, qui va interagir avec le disque de Mach et génération d'un point triple lors de la phase d'enroulement du jet ; (iii) diminution en intensité de ce point triple, pour ne plus laisser qu'une ligne de glissement ; (iv) amplification de cette ligne par les allers-retours des ondes transverses et finalement formation à nouveau d'un point triple. Le processus de bifurcation (i) et (ii) avait été clairement identifié par Mach et Radulescu [227] et plus tard par Lau-Chapdelaine [234]. Ces derniers ont ainsi construit un diagramme de bifurcation, qui dépend de l'angle d'incidence du choc, de son nombre de Mach et surtout

du coefficient polytropique.

Cependant, dans le cas des gaz parfaits, le coefficient polytropique et le coefficient isentropique se confondent. En adaptant leur classification, l'étude qui a été effectuée nous a montré que c'est bien le coefficient isentropique qui serait le plus pertinent, car plus à même de traduire la compressibilité du gaz. Ainsi, l'influence de l'équation d'état se traduit par une régularisation de la structure cellulaire avec la pression initiale, car le coefficient isentropique post-choc est plus élevé pour un gaz réel que pour un gaz parfait.

Influence de la cinétique chimique sur les détonations non-idéales

Sommaire

5.1	Introduction	111
5.2	Description de la configuration	114
5.2.1	Détermination des paramètres de cinétique chimique	114
5.2.2	Description de configuration d'étude	115
5.3	Topologie de la détonation idéale	117
5.3.1	Dynamique du front de détonation	117
5.3.2	Structure instantanée	119
5.3.3	Analyse de la structure cellulaire	120
5.4	Topologie de la détonation non-idéale	121
5.4.1	Caractéristiques globales	121
5.4.2	Hauteurs critiques et dynamiques d'extinction	123
5.4.3	Analyse des gaz imbrûlés	129
5.5	Comparaison des profils ZND	132
5.6	Synthèse partielle	134

5.1 Introduction

Lorsque la détonation est soumise à des conditions aux limites déformables, l'expansion latérale des gaz brûlés va être la cause d'un déficit de vitesse qui peut conduire à son extinction. Cependant, les détonations gazeuses sont intrinsèquement instables et finissent par développer une structure cellulaire, à laquelle est associé la trajectoire des points triples. La collision des ondes de choc transverses qui va en résulter peut permettre à la détonation de contrebalancer les effets de ces pertes latérales.

Les moteurs à détonation rotative (RDE : Rotating Detonation Engine) font partie des configurations où ce déficit est rencontré. Généralement, les vitesses de propagation mesurées sont significativement inférieures à la vitesse idéale de Chapman-Jouguet, allant de 50-70% D_{CJ} [120]. En outre, elles sont encore inférieures aux vitesses retrouvées par les simulations numériques, dont les valeurs sont généralement supérieures à 90 % D_{CJ} [236]. La Figure 5.1 résume les déficits de vitesse en fonction du débit massique dans un moteur à détonation rotative pour différents mélanges, rapportés dans la littérature. La comparaison des simulations numériques et des mesures expérimentales montre un écart important entre ces déficits de vitesses. L'une des raisons serait que la plupart des simulations numériques envisagent l'injection d'un pré-mélange alors que dans la plupart des expériences, l'injection du combustible et du comburant se fait de façon séparée. Afin de mettre en lumière l'influence du pré-mélange, des études expérimentales ont été menées par Andrus et al [237] sur un RDE fonctionnant en pré-mélange gazeux. Les expériences ont montré que les vitesses de détonation observées sont comparables à celles d'un RDE fonctionnant avec une configuration non pré-mélangée. Les vitesses sont alors de l'ordre de 50 à 55 % de D_{CJ} . La différence dans le déficit de vitesse semble alors être causée par d'autres effets tels que : pertes thermiques, effet géométriques et tridimensionnels, mélanges hétérogènes et finalement les effets liés au confinement par les gaz brûlés. Des

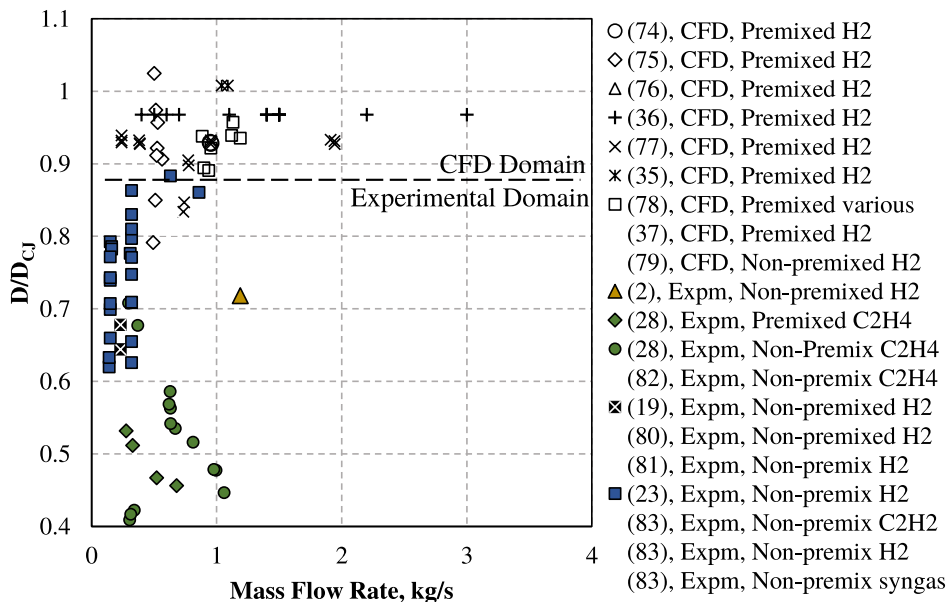


FIGURE 5.1 – Résumé des déficits de vitesses rapportés par des simulations numériques et des expériences sur les moteurs à détonation rotative. Adapté de la thèse de Andrus [236], les données sont collectées des travaux [237-248].

simulation numériques ont été menées par Reynaud et al. [85, 249] et Mi et al. [146] sur l'influence du confinement inerte sur la propagation de la détonation. Des modèles cinétiques

de chimie à une étape ont permis de varier la stabilité du mélange via l'énergie d'activation réduite $E_a/R_u T_0$. Les résultats ont montré que cette interaction est fortement dépendante des propriétés du mélange. En effet, en utilisant un modèle de cinétique chimique à une étape, une détonation stable possède une hauteur limite de propagation différente de celle d'une détonation instable [85]. Les détonations stables révèlent une plus grande résistance aux expansions latérales et se propagent à des hauteurs réactives moindres qu'une détonation instable. Cette dernière est entretenue par la génération d'ondes transverses tandis que la détonation stable est uniquement affectée par la courbure du front engendrée par l'expansion latérale des gaz brûlés [145, 250]. Toutefois, ce résultat numérique semble en contradiction avec les observations expérimentales. Radulescu et al. [38] ont montré expérimentalement qu'un mélange instable soumis à des pertes latérales via des parois poreuses a des limites d'extinction plus petites qu'un mélange stable.

Ce paradoxe existant entre les résultats numériques et expérimentaux a été souligné par Radulescu [251]. L'auteur attribue cette contradiction aux effets dissipatifs non pris en compte dans le modèle numérique des équations d'Euler réactives utilisées. En effet, l'importance des instabilités cellulaires s'illustre à travers la consommation des poches de gaz imbrûlés en aval de la détonation. Leur consommation en surface par les phénomènes dissipatifs contribuerait à renforcer les ondes transverses et permettrait un réamorçage de la détonation à des hauteurs réactives inférieures au cas stable. Bien que l'argument avancé par l'auteur soit pertinent, les résultats numériques sur lesquelles les analyses ont été faites sont basés sur un modèle cinétique chimique à une étape de type loi d'Arrhenius. Par conséquent, il convient d'abord de tester le domaine de validité de cette dernière hypothèse.

Dans cette optique, nous avons réalisé une étude sur l'influence de la modélisation chimique sur la prédiction des limites de propagation d'une détonation. Pour ce faire, deux modèles cinétiques supplémentaires ont été implémentés de degré de complexité croissante : un mécanisme chimique en chaînes ramifiées à trois étapes proposé initialement par Kapila [164] puis par Short et Quirk [24] et une chimie détaillée utilisant un mécanisme cinétique de Mével et al. [252] contenant 9 espèces chimiques avec 21 réactions. Ces modèles sont présentés dans la Section 2.3.

Afin de répondre à cette question, nous avons procédé en deux étapes. Tout d'abord, nous avons réalisé des simulations numériques d'une propagation d'une détonation dans un milieu idéal. Les propriétés globales de la détonation ont été ainsi comparées. Ensuite, nous avons réalisé des études paramétriques sur les détonations semi-confinées par un gaz inerte afin de trouver les limites de propagation prédites par les différents mécanismes cinétiques.

Une comparaison de ces résultats avec les simulations numériques et les expériences rapportées dans la littérature a été effectuée.

5.2 Description de la configuration

La description des paramètres retenus pour les simulations de ce chapitre sont présentées dans cette section. Les mécanismes cinétiques introduits dans la Section 2.3 sont dans un premier temps calibrés. Les configurations de comparaison des trois mécanismes sont finalement décrites.

5.2.1 Détermination des paramètres de cinétique chimique

Les paramètres thermo-chimiques retenus pour cette étude décrivent un mélange stœchiométrique $\text{H}_2 - \text{O}_2$ à $p_0 = 101.25$ kPa et $T_0 = 295$ K. Pour les modèles réduits, ils sont obtenus en comparant les temps d'induction avec ceux calculés à partir du mécanisme de Mével et al. [252]. Le facteur pré-exponentiel A_s et l'énergie d'activation E_a/R_u sont les paramètres pour le modèle à une étape. En effet, l'amplitude des temps d'induction est contrôlée par le premier terme tandis que la pente est contrôlée par le second. Les paramètres k_C , E_I/R_u , E_B/R_u , T_I et T_B ont été simultanément ajustés dans le cas du modèle à trois étapes afin d'obtenir le meilleur compromis à haute et à basse température.

Les valeurs trouvées sont $A_s = 6.0 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$, et $E_a/R_u = 14160$ K, pour le modèle à une étape. De la même façon $k_C = 2 \times 10^7 \text{ s}^{-1}$, $E_I/R_u = 25000$ K, $E_B/R_u = 8500$ K, $T_I = 2431$ K, $T_B = 1350$ K, pour le modèle à trois étapes. La masse molaire et le coefficient adiabatique des deux modèles sont identiques avec $W = 12$ g/mol et $\gamma \simeq 1.33$, respectivement. Les chaleurs de réactions chimiques sont respectivement de $Q = 4.80$ MJ/kg et 4.99 MJ/kg. Ces quantités ont été obtenues par la calibration de la vitesse D_{CJ} pour chaque modèle.

La Figure 5.2 présente les temps d'induction en fonction de l'inverse de la température initiale ainsi que l'erreur relative des modèles réduits par rapport au mécanisme détaillé de Mével. La masse volumique a été fixée à l'état vN, avec une variation de température initiale 900-2000 K et de pression 1.6-3.6 MPa. Les modèles de cinétique réduite observent approximativement le même temps d'induction que celui de la chimie détaillée dans la gamme des températures élevées ($T \geq 1430$ K) avec des écarts moyens respectivement inférieurs à 10% et 5% pour la chimie à une étape et à trois étapes. La chimie à une étape

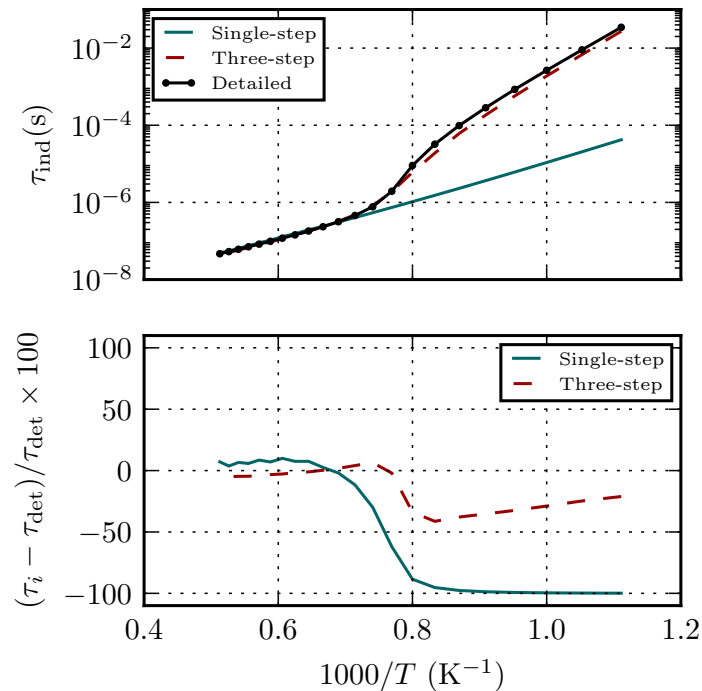


FIGURE 5.2 – (a) : Temps d’induction calculé à partir d’une combustion à volume constant, en fonction de l’inverse de la température. La masse volumique est fixée à ρ_{vN} . (b) : Erreur relative des mécanismes simplifiés par rapport au mécanisme détaillé de Mével [252].

ne prend pas en compte le changement de l’énergie d’activation, typique de la chimie $\text{H}_2 - \text{O}_2$, qui s’opère aux basses températures. En revanche, le modèle à trois étapes prédit les temps d’induction à basses températures avec des écarts moyens inférieurs à 20%, et montre un écart maximal inférieur à 50 % à $T \sim 1250$ K. Pour des températures plus basses ($T < 1250$ K), la chimie à une étape s’écarte de un à trois ordres de grandeurs du mécanisme détaillé.

5.2.2 Description de configuration d’étude

Pour rappel, les simulations réalisées dans ce chapitre sont bidimensionnelles. Deux types de canal ont été sélectionnés. Un canal de dimensions $L_x = 15$ mm, $L_y = 2$ mm est nécessaire pour traiter les détonations marginales et un autre de dimensions $L_x = 15$ mm, $L_y = 20$ mm pour assurer une structure multi-cellulaire, indépendante des conditions aux limites. À l’instant initial, le domaine est rempli de gaz frais. Afin d’amorcer le front de détonation, une zone circulaire de 1 mm de diamètre est mise à l’état vN. Une onde de choc forte va être engendrée, puis une sur-détonation, qui va s’amortir, jusqu’à atteindre l’état stationnaire et auto-entretenue souhaité.

Un schéma de principe de la configuration d’étude est présenté à la Figure 6.39.

Les simulations ont été réalisées en deux étapes. Tout d'abord, une détonation a été amorcée et s'est propagée dans un canal entièrement rempli de mélange réactif, c'est-à-dire stœchiométrique $\text{H}_2\text{-O}_2$, jusqu'à l'obtention d'une structure convergée ($\sim 100 \mu\text{s}$ de propagation) comme présentée précédemment. Les conditions initiales utilisées sont $p_o = 100 \text{ kPa}$, $T_o = 300 \text{ K}$ avec des fractions massiques de carburant, $Y_{\mathcal{F},o} = 1$, pour une cinétique à une étape ; et les espèces de réactifs et de radicaux $Y_{\mathcal{R},o} = 0$ et $Y_{\mathcal{P},o} = 0$, pour une cinétique à trois étapes. Pour la chimie détaillée, les fractions massiques initiales de H_2 et O_2 sont $Y_{\text{H}_2,o} = 0,1112$ et $Y_{\text{O}_2,o} = 0,8888$.

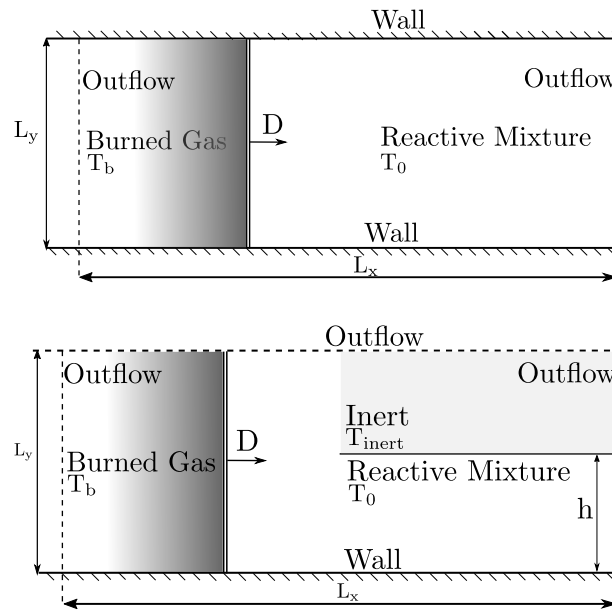


FIGURE 5.3 – Schéma représentatif de la stratégie suivie dans les simulations.

Ensuite, les champs résultants ont été utilisés comme conditions initiales pour des simulations séparées dans lesquelles une hauteur du canal était remplie d'une couche de mélange inerte. Afin d'avoir une comparaison qualitative avec les modèles simplifiés, le rapport d'impédance acoustique, $(\rho a)_{\text{inert}}/(\rho a)_{\text{react}}$ où a est la vitesse du son, a été maintenue constante à une valeur représentative d'un mélange stœchiométrique de $\text{H}_2\text{-O}_2$ surplombé par N_2 ($Y_{\text{N}_2,o} = 1$) à T_o , $[(\gamma_{\text{inert}} W_{\text{inert}} T_{\text{react}})/(\gamma_{\text{react}} W_{\text{react}} T_{\text{inert}})]^{1/2} = 1.52$. Étant donné les hypothèses de la cinétique simplifiée, c'est-à-dire γ et W sont constants, la température de la couche inerte a été calculée en conséquence, donc caractérisée par $Y_{\mathcal{F},o} = Y_{\mathcal{R},o} = 0$ et $Y_{\mathcal{P},o} = 1$, et $T_{\text{inert}} = 124 \text{ K}$. La condition à la limite supérieure du domaine a été modifiée de réflexion symétrique à absorption.

Les simulations numériques présentées dans ce chapitre sont réalisées dans deux centres de calcul régional et national :

- Un super ordinateur THOR, du mésocentre de calcul poitevin. Il est composé 2300

cœurs Intel® Xeon® CPU E5-2680 v2 @ 2.80GHz pour une puissance de 55 TFlops.

- Le supercalculateur OCCIGEN du centre de calcul CINES, composé de 50 544 cœurs Haswell® E5-2690V3@2.6GHz et 35 280 cœurs Broadwell® E5-2690V4@2.6GHz d'une puissance théorique maximum de 3.5 Pflops/s.

La résolution utilisée pour un maillage cartésien et uniforme est fixée à $\Delta x = \Delta y = l_{\text{ind}}/10$ pts. Une étude de convergence numérique détaillée, incluse dans l'annexe D, a été réalisée pour s'assurer que la résolution choisie était suffisante. Les calculs ont été effectués à l'aide de 400-500 processeurs avec une moyenne de 70 millions de cellules par cas. L'étude complète a consommé 2.5 millions d'heures de CPU.

5.3 Topologie de la détonation idéale

Les simulations dans les configurations idéales permettent de mettre en évidence les différences des caractéristiques globales entre les modèles chimiques. Ainsi, dans cette sous-section, nous comparons la dynamique du front de détonation, les champs 2-D instantanés de l'écoulement et les structures cellulaires résultantes.

5.3.1 Dynamique du front de détonation

La Figure 5.4 (a) présente une comparaison de l'évolution de la vitesse instantanée de détonation normalisée par D/D_{CJ} en fonction de la distance parcourue par le front, et sa fonction de densité de probabilité (pdf). Les mesures ont été effectuées sur la partie inférieure du canal. Les pics de vitesse proviennent du passage des points triples. Après leur passage, un disque de Mach est formé dont l'amplitude décroît jusqu'à devenir ensuite un choc incident. La vitesse du front passe alors en dessous de D_{CJ} , induisant un découplage local avec la zone de réaction. Un nouveau cycle commence, à la suite d'un nouveau passage des points triples, entraînant une accélération brutale du front. Les oscillations observées sur les trois mécanismes sont similaires. Ils représentent un comportement chaotique qui est une caractéristique de ce mélange modérément instable, suivant la classification de Libouton et al. [59]. Néanmoins, plusieurs caractéristiques sont à rapporter à partir de la pdf. Les trois modèles semblent maintenir la même décroissance de la pdf pour $D/D_{CJ} < 0.8$ et $D/D_{CJ} \geq 1.2$. La région située entre $0.8 < D/D_{CJ} < 1.2$ semble être plate. Ce comportement semble différent des observations expérimentales [253], et numériques [254] rapportées dans la littérature. Cependant, les détonation de notre étude sont multi-cellulaires, avec des hauteurs de canal plus grandes, loin des conditions

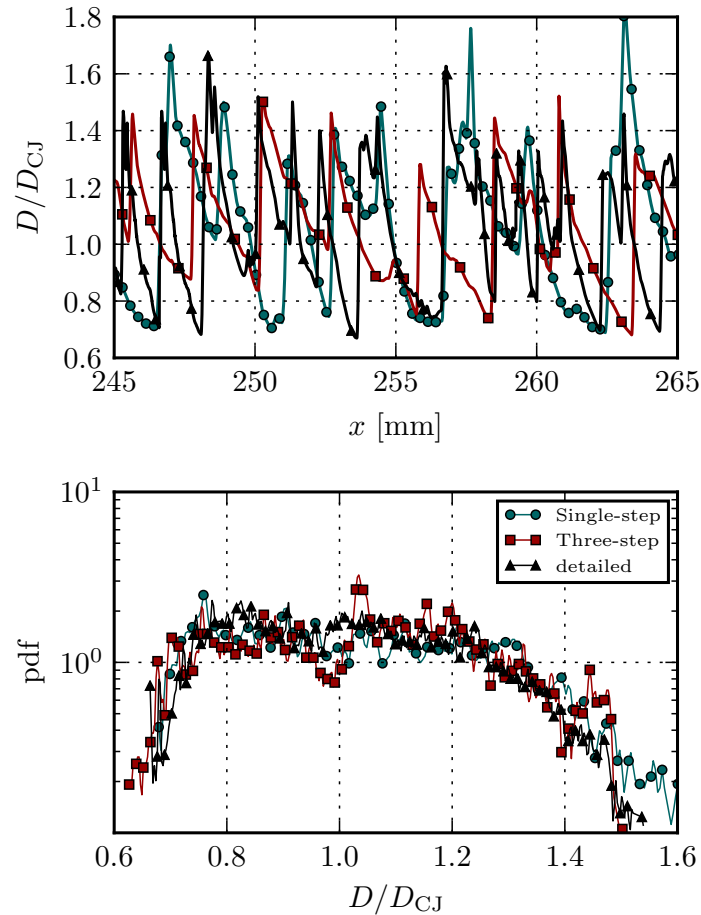


FIGURE 5.4 – Vitesse instantanée normalisée du front de choc en fonction de la distance (en haut). Fonction de densité de probabilité de la vitesse du choc principal (en bas) pour une chimie à une étape, une chimie à trois étapes et une chimie détaillée – détonation idéale. La détonation s’est propagée environ $100 \mu\text{s}$.

marginales.

Les différences entre les trois modèles sont observables pour les valeurs D/D_{CJ} avoisinant l’unité et de 1.4.

Finalement, il est à noter que la température à l’état vN pour la chimie à trois étapes quand $D/D_{CJ} < 0.86$ est en dessous de la température de croisement ($T_s < T_B$). Ainsi, la production des radicaux est fortement ralentie. Cela augmente significativement le temps d’induction jusqu’à deux ordres de grandeur par rapport au temps à l’état vN ($\sim 0.1\mu\text{s}$). Il sera démontré par la suite que cela va avoir un effet direct sur l’allure des champs 2-D. Dans l’ensemble, la dynamique globale du front de détonation semble être raisonnablement capturée par les modèles cinétiques réduits.

5.3.2 Structure instantanée

Les champs bidimensionnels instantanés de la température normalisée (T/T_o) et Schlieren numérique calculé à partir du gradient de masse volumique ($|\nabla\rho|/|\nabla\rho_{\max}|$) sont présentés dans la Figure 5.5 pour les trois modèles. Les images sont collectées après $\sim 100 \mu\text{s}$ correspondant à $\sim 300 \text{ mm}$ de propagation. Cela permet que les résultats soient indépendants des aspects transitoires, dus à l'amorçage. Les trois modèles sont présentés à un instant où la structure du front est similaire afin d'identifier les différences. D'une façon globale, les fronts sont composés de trois points triples, dont deux qui amorcent une trajectoire descendante et un qui vient de subir une réflexion à la paroi inférieure. Un choc incident, compris entre deux points triples qui se propagent l'un en direction de l'autre est marqué par une zone de réaction plus épaisse. Le reste du front est composé de disques de Mach avec une zone de réaction moins épaisse. Dans le cas des deux mécanismes réduits, une onde transverse vient de se réfléchir sur la paroi inférieure et entame sa course vers la paroi supérieure. Les températures augmentent considérablement derrière cette onde. Pour la chimie détaillée, plusieurs ondes transverses sont constatées. Les poches de gaz imbrûlés sont détachées du front et convectées vers l'aval. Le temps nécessaire à leur consommation semble dépendre du mécanisme cinétique. Cela s'observe par l'évolution de la surface de la poche des gaz imbrûlés en aval du front.

Ces poches se consomment de trois différentes manières : (i) volumique à travers une combustion à volume constant ; (ii) par aller retour d'ondes transverses qui accentuent les instabilités de type Richmayer-Meshkov aux frontières de la poche ; (iii) par diffusion. Les deux premiers sont les seuls que le modèle non visqueux utilisé dans cette étude permettrait de reproduire. Dans les Schlieren de la chimie détaillée, les structures sont relativement petites et les ondes transverses sont plus fortes que celles observées pour la chimie à une étape et à trois étapes. Ceci est conforme aux observations de Taylor et al. [255] où l'auteur compare les structures de l'onde de détonation pour un mélange H_2 -Air entre deux mécanismes cinétiques (détaillée et à une étape). Enfin, les poches de gaz imbrûlés sont plus grandes et semblent durer plus longtemps en aval de l'écoulement pour les deux modèles simplifiés considérés, alors que la chimie détaillée montre une température plus uniforme des gaz brûlés. Les longueurs d'inductions, l_{ind} , observées derrière les choc précurseur sont comparables en termes d'ordre de grandeurs pour les trois cas.

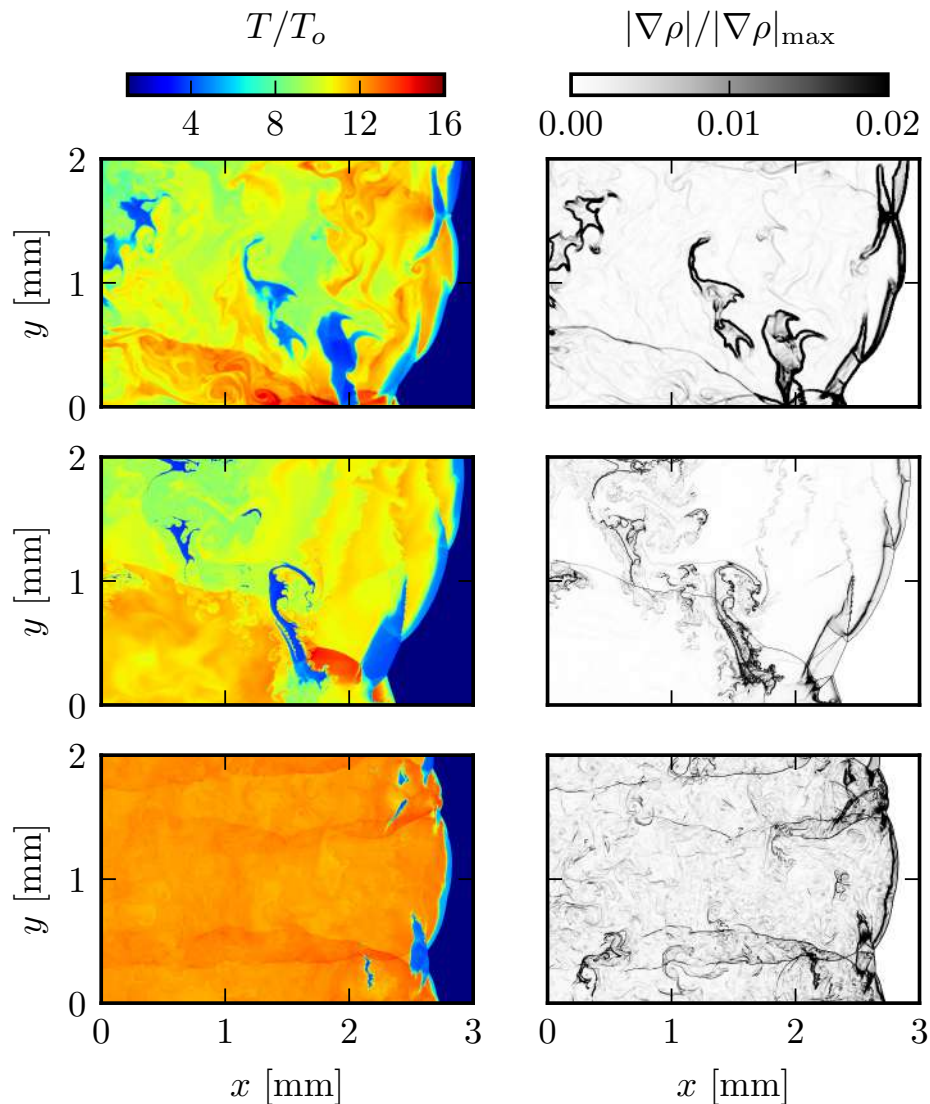


FIGURE 5.5 – Gauche : Champs de température normalisée. Droite : Schlieren de densité. Comparaison entre les mécanismes : Haut : une étape, milieu : trois étapes, bas : chimie détaillée.

5.3.3 Analyse de la structure cellulaire

La Figure 5.6 révèle la structure cellulaire de l'écoulement associé aux trois mécanismes cinétiques. Ces enregistrements ont été entamés après que la détonation ait terminé la phase transitoire initiale. Malgré les différences observées dans les champs instantanés, tous les modèles chimiques présentent des caractéristiques similaires en ce qui concerne l'irrégularité des cellules de détonation. Des histogrammes montrant la distribution des tailles de cellules sont également présentés dans la colonne de droite. Les données ont été obtenues en mesurant manuellement toutes les largeurs de cellules présentes (90 échantillons par cas), puis en triant les données par nombre d'occurrences sur une échelle donnée,

c'est-à-dire par fréquence (#). Cette analyse nous a permis de définir une taille de cellule caractéristique pour chaque modèle chimique ainsi que de déterminer plus précisément leurs moyennes. Les schémas cinétiques simplifiés montrent une distribution des échelles de longueur plus large que celle de la chimie détaillée, qui semble également se limiter à l'extrémité inférieure du spectre. Les tailles moyennes des cellules sont respectivement de 1.7, 1.3 et 0.8 mm pour la chimie à une étape, à trois étapes et détaillée. La taille caractéristique la plus fréquente des cellules d'après les histogrammes est respectivement, de 1.8, 1.2 et 0.6 mm. La taille des cellules a donc été estimée numériquement à environ $0.8 \text{ mm} \leq \lambda_{\text{num}} \leq 1.7 \text{ mm}$ alors que la taille des cellules rapportée expérimentalement est de l'ordre de $1.4 \text{ mm} \leq \lambda_{\text{exp}} \leq 2.1 \text{ mm}$ [256]. La présence de cellules plus petites dans la chimie détaillée est bien connue dans la littérature. Cela n'est pas dû à un manque de résolution numérique (voir Annexe D) mais pourrait provenir d'incertitudes du modèle réactionnel, des effets hors-équilibre entre les températures de translation et de vibration ([255, 257, 258]), voire effets tridimensionnels [150].

5.4 Topologie de la détonation non-idéale

Les différences entre les trois modèles dans le cas semi-confiné sont étudiées dans cette sous-section. La détonation quasi-stationnaire calculée ci-dessus va maintenant se propager dans un mélange réactif, confiné par une couche inerte. En se basant sur les travaux précédents effectués par notre l'équipe [259] avec une chimie à une étape, la hauteur critique pour un mélange stœchiométrique $\text{H}_2\text{-O}_2$ confinée par N_2 est $h_{\text{crit}} = 18 \text{ mm}$. Le mécanisme cinétique adopté dans cette précédente étude avait été ajusté pour faire correspondre la taille de cellule numérique et la vitesse de détonation avec les données expérimentales [256].

Cependant, dans notre étude, les paramètres cinétiques ont été calibrés différemment, de façon à restituer au mieux τ_{ind} . Et comme E_a/R_u est plus élevée ici, la hauteur critique h_{crit} devrait être plus élevée [146, 249, 259]. Nous avons ainsi effectué des simulations avec une hauteur réactive légèrement supérieure à cette valeur, $h = 20 \text{ mm}$, afin de comparer les caractéristiques de détonation, issues des trois modèles chimiques.

5.4.1 Caractéristiques globales

La Figure 5.7 montre les différents champs obtenus après $20 \mu\text{s}$ d'interaction de la détonation avec la couche de pré-mélange réactif, confinée par gaz inerte. Les températures

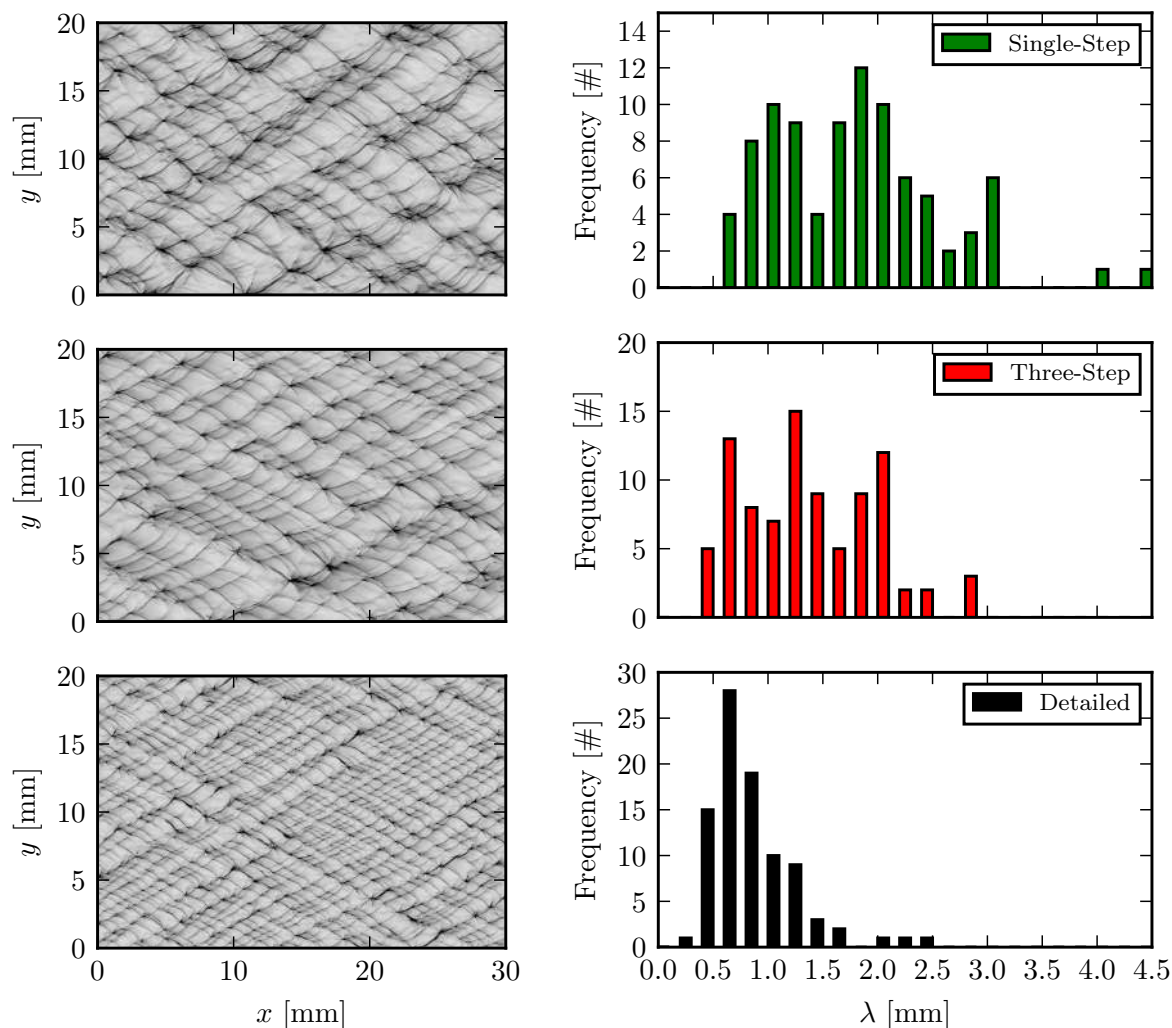


FIGURE 5.6 – Gauche : Historique des maxima de pression illustrant la structure cellulaire de la détonation. Droite : Histogramme montrant la distribution des tailles de cellules λ pour les trois modèles de cinétique retenus. Haut : chimie à une étape. Centre : Chimie à trois étapes. Bas : Chimie détaillée. L'épaisseur du canal est de $h = 20$ mm.

normalisées et les Schlieren numériques sont comparées entre les trois cas : chimie à une étape (haut), chimie à trois étapes (centre) et chimie détaillée (bas). Le front de détonation se propage de la gauche vers la droite du domaine de calcul. La ligne en trait noire située à $y = 20$ mm dans les figures du Schlieren montre la séparation entre les gaz frais et le gaz inerte. Les caractéristiques globales sont similaires pour les trois cas. Le front de détonation se propage dans les gaz frais avec une courbure vers le gaz inerte, engendrée par l'expansion latérale des gaz brûlés en direction du confinement. Un faisceau de détente de Prandtl-Meyer est centré sur l'intersection du choc oblique avec le front de détonation, au niveau de l'interface des gaz frais avec le gaz inerte.

Des différences significatives apparaissent en comparant d'une façon plus approfondie les champs. Alors que la détonation semble se propager sans difficulté dans le cas de

la chimie détaillée, la structure dans les cas à une étape et à trois étapes présente un comportement plus instable avec des poches importantes de gaz imbrûlés réparties sur l'ensemble du domaine, ainsi que des longueurs d'induction plus importantes. La courbure du front pour tous les modèles chimiques est une signature inhérente de la présence d'un déficit de vitesse. La détonation avec la chimie détaillée semble être moins affectée, alors que la détonation avec la chimie à une seule étape et à trois étapes présente des courbures locales plus importantes. Un examen plus approfondi de l'écoulement à des instants ultérieurs (Figure 5.8) $\sim 100 \mu\text{s}$ de propagation, après la première interaction avec le confinement inerte, révèle que la détonation continue de se propager sans aucun problème pour le cas de la chimie détaillée. En revanche, la détonation ne peut maintenir sa propagation dans les cas des chimies simplifiées. Ce résultat suggère que les limites d'extinction, caractérisées ici à l'aide de h_{crit} , dépendent du choix de la modélisation chimique utilisée. Pour trouver la hauteur critique h_{crit} , la hauteur réactive h devrait être augmentée pour les chimies à une et trois étapes, et diminuée pour la chimie détaillée. En effet, pour les modèles simplifiés, la détonation ne s'est pas propagée, alors que pour le mécanisme détaillé, elle s'est transmise avec succès.

Quinze simulations supplémentaires ont été effectuées, en augmentant et diminuant progressivement la hauteur réactive h , pour quantifier les différences de h_{crit} entre les différents modèles chimiques.

5.4.2 Hauteurs critiques et dynamiques d'extinction

Les valeurs de la hauteur critique h_{crit} sont respectivement de 24, 20 et 6 mm pour la chimie à une étape, à trois étapes et détaillée. Si les différences dans la structure des écoulements sont plus prononcées lorsque l'on compare les modèles à des hauteurs fixes (Figures 5.7 et 5.8); proches de h_{crit} , les champs instantanés présentent des similitudes (Figure 5.9), à savoir une courbure accrue et la présence de poches de gaz imbrûlés, ainsi que deux zones distinctes : (i) découplage du front de choc incident et de la zone de réaction, proche de l'interface entre le pré-mélange réactif et le gaz inerte; et (ii) propagation quasi non-perturbée, proche de la paroi inférieure. Afin d'approfondir l'analyse de la dynamique de l'extinction, des historiques de maximum de pression pour des hauteurs légèrement supérieures à h_{crit} ont été examinées pour observer le comportement de la structure cellulaire de la détonation lorsque celle-ci subit des pertes. Le début de l'interaction entre la détonation et le domaine semi-confiné est situé à 10 mm de la limite gauche ($x = 10$ mm) pour toutes les plaques présentées.

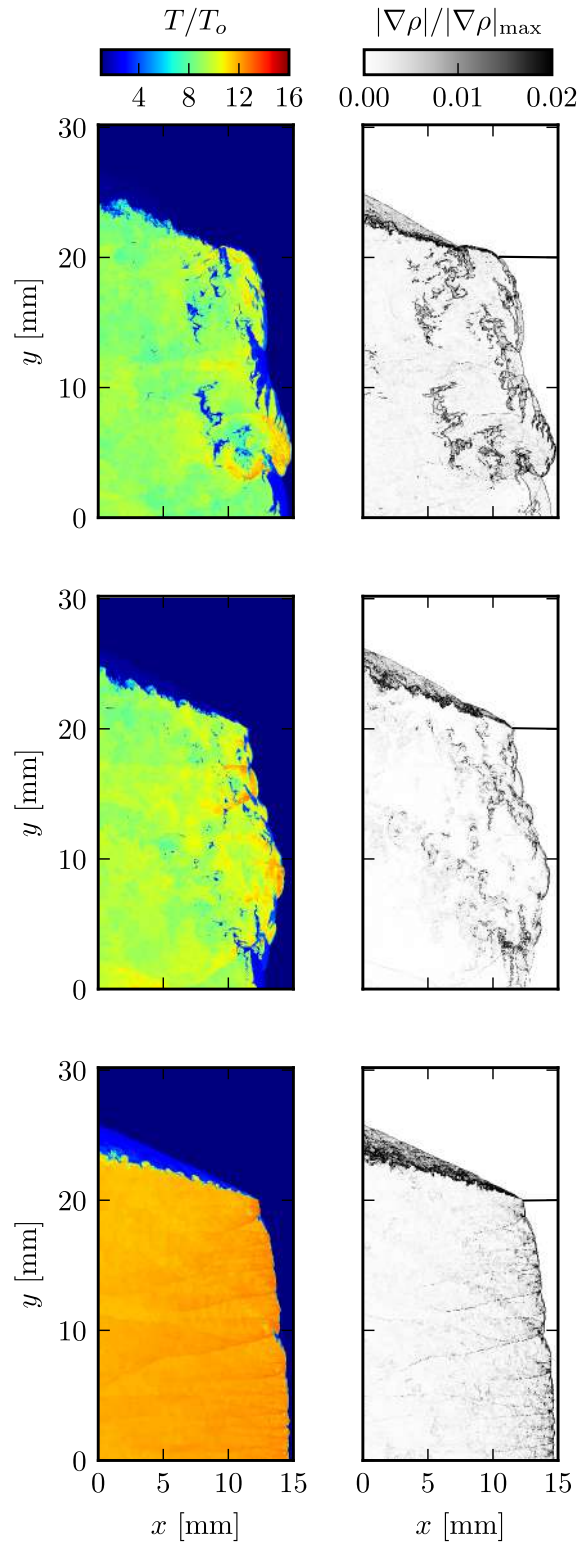


FIGURE 5.7 – Structure instantanée du front de détonation pour la chimie à une étape (en haut), la chimie à trois étapes (au centre) et la chimie détaillée (en bas) après $20 \mu\text{s}$ de propagation dans la configuration semi-confinée. La hauteur de la couche réactive est de $h = 20 \text{ mm}$. La ligne horizontale en trait plein montre l'emplacement de l'interface réactif/inerte.

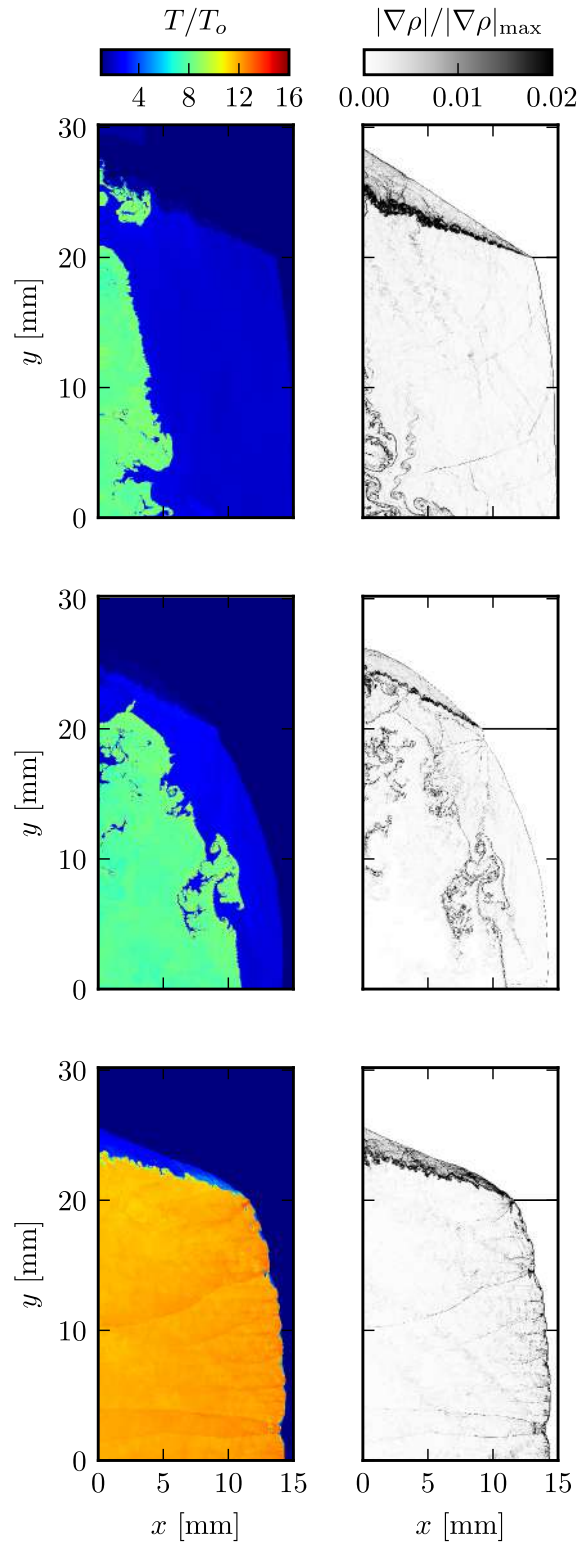


FIGURE 5.8 – Structure instantanée du front de détonation pour la chimie à une étape (en haut), la chimie à trois étapes (au centre) et la chimie détaillée (en bas) après $100 \mu\text{s}$ de propagation dans la configuration semi-confinée. La hauteur de la couche réactive est de $h = 20 \text{ mm}$. La ligne horizontale en trait plein montre l'emplacement de l'interface réactif/inerte.

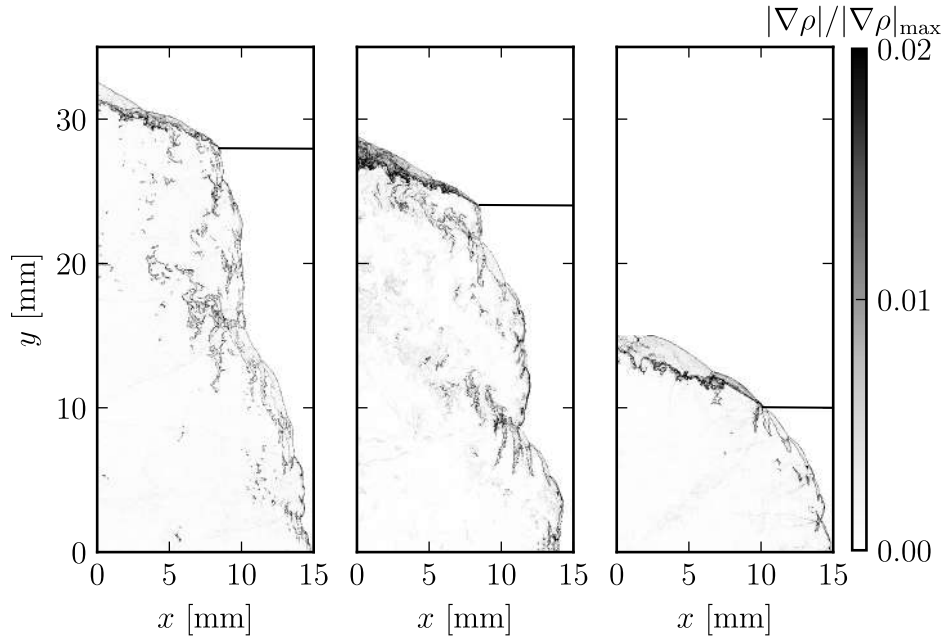


FIGURE 5.9 – Comparaison des champs de Schlieren numérique entre les trois modèles cinétiques pour une hauteur réactive légèrement supérieure à la hauteur critique h_{crit} correspondante. Gauche : chimie à une étape ($h = 28$ mm). Centre : chimie à trois étapes ($h = 24$ mm). Droite : chimie détaillée ($h = 10$ mm))

Chimie à une étape

La Figure 5.10 montre la structure cellulaire associée à l'interaction de l'onde de détonation avec deux épaisseurs réactives $h = 28$ mm (haut) et $h_{\text{crit}} = 24$ mm (bas). La zone blanche située dans la partie supérieure du domaine représente le gaz inerte. Pour $h > h_{\text{crit}}$, la détonation se propage. La première interaction avec la couche de gaz inerte se traduit par la présence de stries obliques, qui vont vers la paroi inférieure et le long desquelles la taille des cellules augmente. Cette augmentation de la taille de cellule est causée par la présence de détentes centrées à l'interface initiale, qui vont découpler partiellement la zone de réaction du front de choc. À la suite de la réflexion sur la paroi inférieure ($x \sim 110$ mm), une nouvelle bande de cellules se forme, orientée cette fois-ci vers l'interface ($x = 140 - 150$ mm). En amont de ces stries, on peut observer des plus petites cellules, qui signifient le passage d'une sur-détonation et ainsi d'un réamorçage local à la paroi inférieure. La détonation peut ensuite continuer à se propager.

Pour $h = h_{\text{crit}}$, la dynamique est similaire à celle décrite précédemment, excepté qu'après la première réflexion à la paroi inférieure, la détonation ne peut plus continuer à se propager.

L'état thermodynamique généré au niveau de la paroi lors de la réflexion, et l'échelle de

temps chimique qui lui est associée, n'est plus suffisant pour concurrencer le refroidissement induit par l'expansion provenant de l'interface. Cela entraîne finalement une extinction globale du front.

La distance à l'extinction, x_Q , définie comme la longueur à partir de laquelle un découplage complet du front est observé, se situe autour de 200 mm pour une chimie à une seule étape.

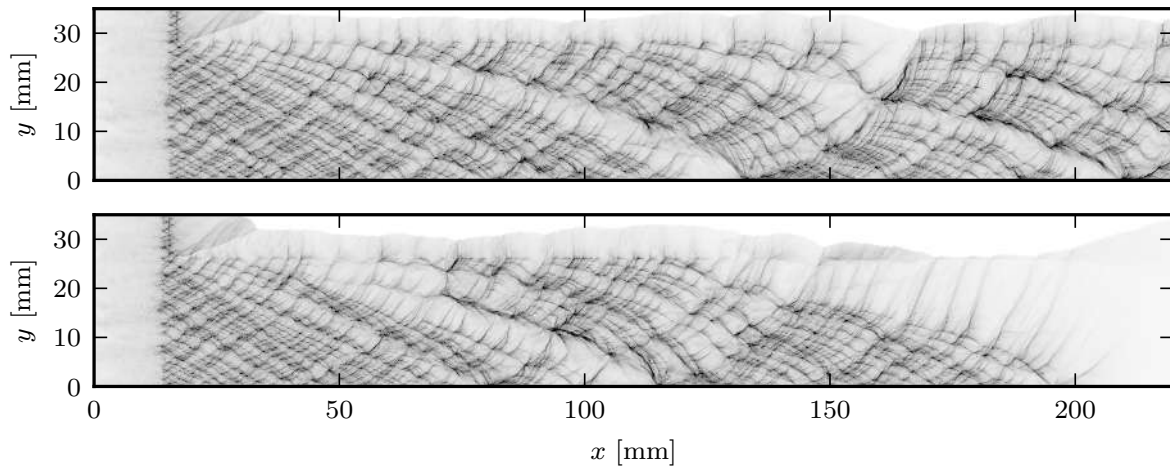


FIGURE 5.10 – Structure cellulaire du modèle à une seule étape pour deux hauteurs de couches réactives : $h = 28$ mm - (Haut) ; $h_{\text{crit}} = 24$ mm (Bas).

Chimie à trois étapes

La structure cellulaire associée au modèle de chimie à trois étapes est présentée dans la Figure 5.11. Deux phases dans la transition après l'interaction sont constatées pour $h = 24$ mm $>$ h_{crit} (Figure 5.10 haut). La première s'illustre par la bande claire et épaisse formée immédiatement après le contact avec l'interface entre le mélange réactif/inerte (10 mm $<$ $x <$ 75 mm). L'absence de cellules dans cette région indique qu'un découplage complet entre la zone de réaction et le choc principal s'est produit, entraînant une extinction partielle du front. Dans le cas de la cinétique à une étape, seule une augmentation progressive de la taille des cellules a été observée. La deuxième phase se présente après réflexion à $x \sim 90$ mm. On constate qu'un réamorçage se produit à l'interface et se propage ensuite vers la paroi inférieure et qu'après la réflexion ($x \sim 90$ mm), le front est complètement réamorcé ($x \sim 98$ mm). Des observations similaires ont été rapportées dans les expériences réalisées par Murray et Lee [126]. Pour $h = h_{\text{crit}} = 20$ mm, la Figure 5.11 (bas), montre le même mécanisme d'extinction que celui décrit pour la cinétique à une étape, avec de fortes détonations pénétrant au sein de la zone de réaction et conduisant à

un découplage complet. Un réamorçage local se produit à l'interface à $x \sim 120$ mm mais ne parvient à réamorcer le front de détonation. Dans le cas à de la chimie à trois étapes, $x_Q \simeq 140$ mm.

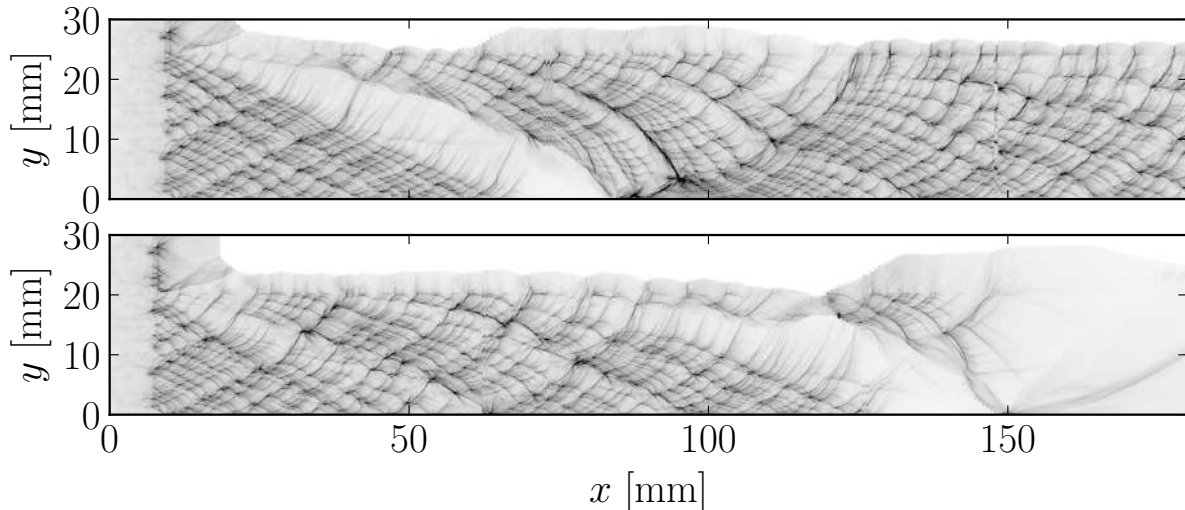


FIGURE 5.11 – Structure cellulaire du modèle à trois étapes pour deux hauteurs : $h = 24$ mm (haut) ; $h_{\text{crit}} = 20$ mm (bas).

Chimie détaillée

La structure cellulaire obtenue pour la chimie détaillée semble contenir plus d'interactions, y compris certaines des caractéristiques observées dans la chimie à une étape et à trois étapes. Pour $h = 10$ mm $> h_{\text{crit}}$ (Figure 5.12 - haut) l'interaction avec l'interface (10 mm $< x < 55$ mm) est caractérisée par une taille de cellule qui augmente progressivement sans extinction locale comme attesté dans la dynamique décrite pour la chimie en une seule étape. Pour 50 mm $< x < 115$ mm une bande claire qui apparaît à l'interface confirme une extinction globale puis complète du front. Le comportement de la structure cellulaire est désormais conforme à la dynamique décrite dans les cas précédents. Cependant, le rétablissement de l'onde de détonation se fait en plusieurs étapes d'extinction et de réamorçage. Un ré-allumage final a réussi à se produire, causé par la réflexion sur la paroi inférieure à $x \sim 105$ mm de noyaux d'allumage qui ont émergé du confinement [118, 119].

Pour $h = h_{\text{crit}} = 6$ mm (Figure 5.12 - bas), le découplage du front se produit progressivement à partir de $x \sim 55$ mm, induit par les détentes émanant de l'interface. Aucune tentative locale d'extinction ou de réamorçage n'a été observée à cette hauteur de la couche réactive. La distance x_Q pour la chimie détaillée est de 60 mm. La chimie à trois étapes et

la chimie détaillée montrent une dynamique de réamorçage similaire, c'est-à-dire par un réamorçage local à l'interface du confinement inerte. Le front de sur-détonation local va ensuite se réfléchir sur la paroi inférieure. Cela se traduit par une ligne de points triples plus marquée sur la structure cellulaire. Le Tableau 5.1 résume les hauteurs critiques et

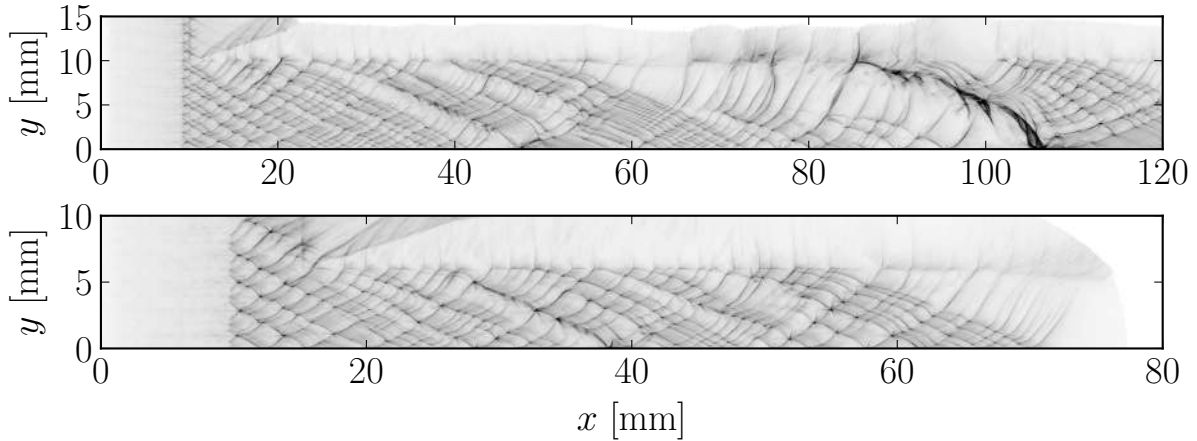


FIGURE 5.12 – structure cellulaire pour la chimie détaillée pour deux hauteurs de couches réactives : $h = 10$ mm (haut) ; $h_{crit} = 6$ mm (bas). Notez que les échelles horizontale et verticale sont différentes pour faciliter la visualisation de la structure cellulaire.

les distances à l'extinction obtenues. La valeur de h_{crit} prédite par la chimie détaillée est en très bon accord avec les valeurs expérimentales [260]. La cinétique simplifiée donne des valeurs de h_{crit} qui sont de trois fois (trois étapes) et quatre fois (une étape) plus grandes que celles obtenues avec la chimie détaillée. Enfin, les distances à l'extinction, x_Q , augmentent avec la diminution de la complexité de la modélisation chimique de sorte $x_{Q, \text{détaillé}} \ll x_{Q, \text{3-Step}} < x_{Q, \text{1-Step}}$.

TABLE 5.1 – Hauteurs critiques h_{crit} et distances à l'extinction x_Q obtenues pour les différents modèles.

Modèle chimique	h_{crit} (mm)	x_Q (mm)
une étape	24	200
trois étapes	20	140
détaillée	6	60
Expérimental [119]	4.6	–

5.4.3 Analyse des gaz imbrûlés

Pour tenter de comprendre la résilience accrue face aux pertes que présente la chimie détaillée, une analyse de l'un des mécanismes par lequel les poches de gaz imbrûlés

se consument, à savoir la combustion à volume constant a été réalisée. En outre, une estimation simple des échelles de temps diffusifs a été fournie. La Figure 5.13 montre une vue d'ensemble du Schlieren de l'écoulement peu après l'interaction avec l'interface inerte, et un agrandissement sur une poche de gaz imbrûlés, située proche de l'interface. En

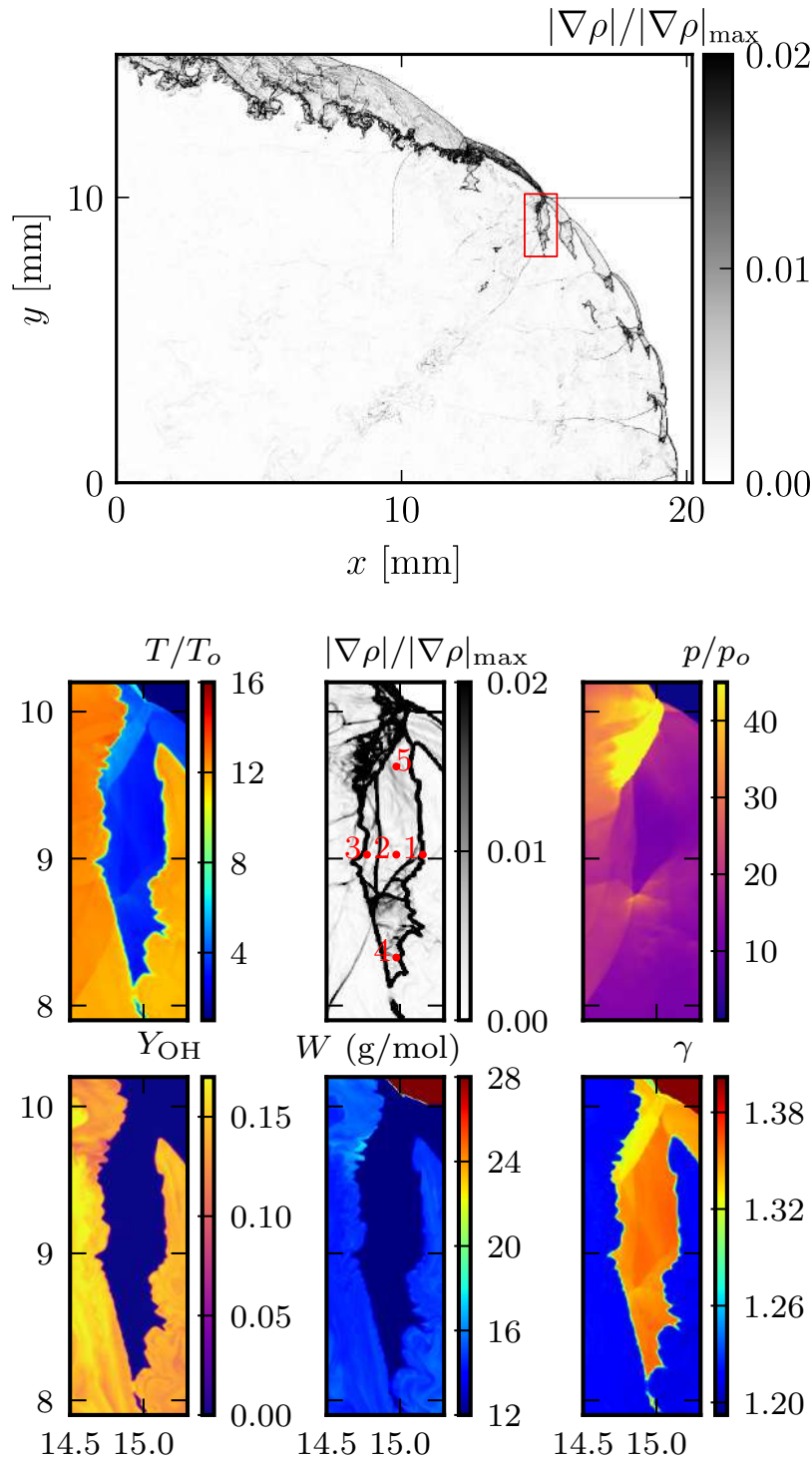


FIGURE 5.13 – En haut : Schlieren numérique de l'écoulement. En bas : agrandissement sur une poche de gaz imbrûlés, située proche de l'interface.

utilisant l'état thermodynamique (p et T) à cinq endroits différents situés à l'intérieur de la poche de gaz imbrûlé, les délais d'induction ont été calculés de deux manières différentes. La première a été effectuée en supposant que la composition est celle d'un mélange frais ($Y_{\text{H}_2,\text{o}}$ et $Y_{\text{O}_2,\text{o}}$), qu'on note cas 1. La seconde a été effectuée en utilisant la composition locale, issue de la simulation, dénotée cas 2. Cela permet d'évaluer l'effet de la présence des radicaux dans la poche. Pour la chimie en une ou trois étapes, seul le cas 1 peut être considéré en utilisant $Y_f = 1$. La Figure 5.14 montre les délais d'auto-inflammation

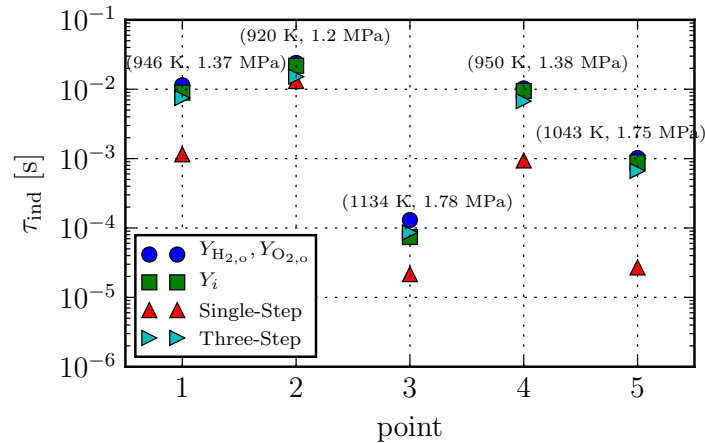


FIGURE 5.14 – Délais d'induction à volume constant, τ_{ind} , calculés à différents endroits à l'intérieur de la poche de gaz imbrûlés.

obtenus pour les cas énoncés précédemment. La présence de radicaux n'a pas permis une accélération importante du processus de combustion. Les différences ne sont pas suffisamment significatives pour expliquer la plus grande résistance de la détonation aux pertes dans le cas de la chimie détaillée. Il faut cependant garder à l'esprit que l'état thermodynamique de cette poche est en constante évolution car elle est soumise à des ondes de choc transverses et des détentes dont l'effet global pourrait se traduire par une diminution effective de τ_{ind} . De plus, il existe des variations de plus d'un ordre de grandeur sur τ_{ind} sur chaque point examiné entre la chimie à une étape et la chimie détaillée. Les délais d'auto-inflammation obtenus avec la chimie à une étape sont inférieurs à ceux de la chimie détaillée, comme prédit la Figure 5.2.

Une simple estimation d'ordre de grandeur pour déterminer si les temps diffusifs sont comparables aux délais d'autoallumage, consiste à prendre le rapport du carré d'une échelle de longueur caractéristique associée à la poche (0.1 – 0.5 mm - mesuré à partir de la figure) à la diffusivité thermique du mélange aux conditions thermodynamiques locales $\tau_{\text{diff}} = L^2/\alpha$. En prenant les valeurs minimales et maximales de p et T dans la poche (1205 kPa ; 920 K et 1782 kPa ; 1134 K), α varie de 4.317×10^{-5} à 4.536×10^{-5} m²/s. Si l'on prend sa moyenne arithmétique et les valeurs de L ci-dessus, l'échelle de temps

diffusif se situe entre $2,226 \times 10^{-4} \text{ s} \leq \tau_{\text{diff}} \leq 5.648 \times 10^{-3} \text{ s}$ qui sont du même ordre que τ_{ind} (voir Figure. 5.14). Ces valeurs sont bien loin des échelles de temps typiques de détonation ($\sim 1 \mu\text{s}$). Sur la base de cette estimation, il est plausible que les effets diffusifs puissent jouer un rôle dans la combustion de ces poches. Néanmoins, comme le modèle non visqueux utilisé ici ne les inclut pas et que la valeur de h_{crit} obtenue est en accord avec les observations expérimentales, d'autres facteurs doivent être mis en jeu dans la chimie détaillée qui déterminent la dynamique de l'extinction.

La chimie détaillée tient compte des changements de masse molaire, W , et du rapport des chaleurs spécifiques, γ , en fonction de T . Ces effets sont négligés dans les modèles à chimie réduite. En outre, les diverses échelles de temps chimiques associées à chacune des réactions élémentaires présentes dans le mécanisme détaillé peuvent jouer un rôle conséquent. La Figure 5.13 présente les variations de W et γ dans la poche de gaz imbrûlés. La masse molaire W varie de 12 g/mol dans les gaz frais choqués à 14-16 g/mol dans les gaz brûlés (à cause de la présence des dissociations). Cela entraîne une augmentation de la température des produits. De plus, γ présente des variations importantes à l'intérieur de la poche elle-même (1.33-1.36), suivies d'une diminution vers ~ 1.21 dans les produits brûlés. Aucune de ces observations ne permet de fournir de réponses concluantes quant aux différences de h_{crit} obtenues entre les modèles chimiques.

5.5 Comparaison des profils ZND

La structure ZND obtenue avec tous les modèles chimiques est présentée sur la Figure 5.15. Les longueurs caractéristiques de chaque modèle sont définies de la façon suivante. Pour la chimie à une étape, on définit la demi-longueur de réaction $l_{1/2, 1\text{-Step}} = 70 \mu\text{m}$. Elle est définie comme la distance entre le choc et la position où la moitié du combustible est consommée. Comme mentionné précédemment, le modèle à une étape ne comporte pas de zone d'induction. Pour la chimie à trois étapes et la chimie détaillée, on définit les longueurs d'induction suivantes : $l_{\text{ind}, 3\text{-Step}} = 17 \mu\text{m}$ et $l_{\text{ind}, \text{Detailed}} = 35 \mu\text{m}$. Elles sont définies comme la distance entre le choc principal et la position du maximum de thermicité $\dot{\sigma}_{\text{max}}$.

À l'état von Neumann, toutes les valeurs sont très proches entre les trois modèles, avec une légère différence dans la masse volumique et la pression. Le constat est similaire pour l'état CJ ($x/l_{\text{ind}} \sim 7$) sauf pour le profil de température. En effet, la température est plus élevée pour la chimie détaillée. Cet effet est simplement une conséquence de la prise en compte des variations de la masse molaire W . On peut le montrer en utilisant la loi des

gaz parfaits : $T_{CJ} = (p/\rho R_u)_{CJ} W_{Detailed}$, puisque la valeur du premier terme à droite de l'expression est approximativement la même pour tous les modèles chimiques. Une autre différence évidente dans tous les profils sont les trajectoires du mélange entre les états vN à CJ. Les profils de thermicité, $\dot{\sigma}$, montrent un comportement intéressant pour l'analyse de

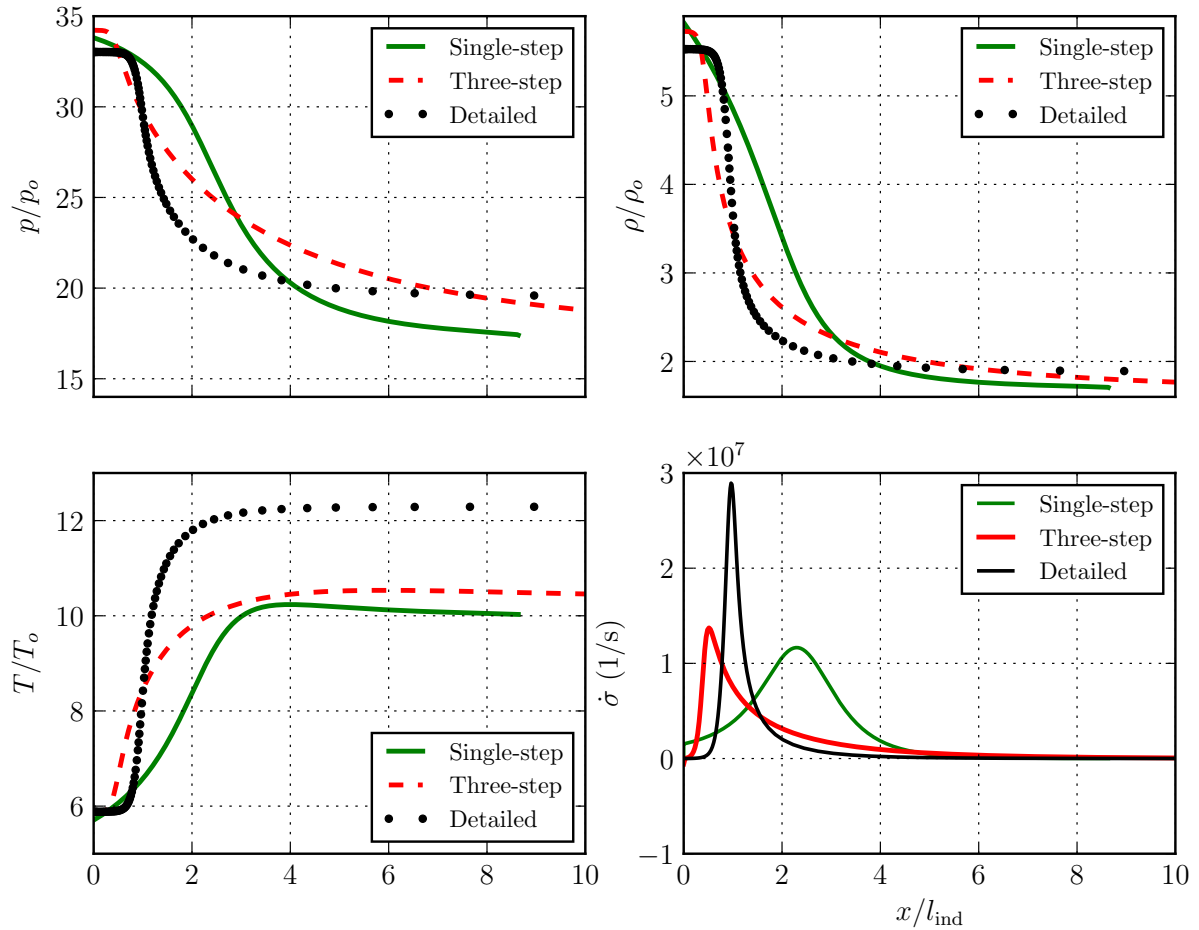


FIGURE 5.15 – Structure ZND en utilisant une chimie à une étape, une chimie à trois étapes et une chimie détaillée. La pression, la densité et la température sont normalisées par leurs valeurs dans le mélange frais, la distance par $l_{ind, Detailed} = 35 \mu\text{m}$. La thermicité $\dot{\sigma}$ est conservée sous sa forme dimensionnelle.

la résistance de la chimie détaillée dans le cas semi-confiné. Les vitesses de dégagement de la chaleur, leurs maxima, ainsi que les longueurs d'induction et de dégagement de chaleur pour les cinétiques simplifiées diffèrent sensiblement par rapport à la chimie détaillée. Cela suggère que la stabilité du mélange, qui peut être aussi caractérisée par le paramètre χ [112, 261] est différente, bien que les modèles simplifiés aient été calibrés pour restituer les temps d'induction.

Le paramètre de stabilité χ est défini par :

$$\chi = \frac{T_{vN}}{\tau_{ind}} \cdot \frac{\partial \tau_{ind}}{\partial T} \cdot \frac{l_{ind}}{l_{reac}} \quad (5.1)$$

où $l_{\text{reac}} = u_{\text{CJ}}/\dot{\sigma}_{\text{max}}$ représente la longueur de la zone de réaction, T_{vN} et u_{CJ} sont respectivement la température et la vitesse d'écoulement à l'état de von Neumann et Chapman-Jouguet. Pour comparer les valeurs de χ entre les modèles chimiques, nous pouvons écrire un rapport générique comme suit :

$$\frac{\chi_a}{\chi_b} = \left(\frac{T_{\text{vN},a}}{T_{\text{vN},b}} \right) \left(\frac{\tau_{\text{ind},b}}{\tau_{\text{ind},a}} \right) \left(\frac{\partial \tau_{\text{ind},a}}{\partial \tau_{\text{ind},b}} \right) \left(\frac{l_{\text{ind},a}}{l_{\text{ind},b}} \right) \left(\frac{u_{\text{CJ},b}}{u_{\text{CJ},a}} \right) \left(\frac{\dot{\sigma}_{\text{max},a}}{\dot{\sigma}_{\text{max},b}} \right) \quad (5.2)$$

où a et b sont les indices correspondant aux modèles comparés. Comme la température de von Neumann et les délais associés, ainsi que leurs pentes (i.e. énergie d'activation) dans la gamme des températures élevées sont approximativement les mêmes pour tous les mécanismes, les premiers trois rapports dans l'équation 5.2 sont proches de l'unité. Cela simplifie considérablement l'expression :

$$\frac{\chi_a}{\chi_b} \sim \left(\frac{l_{\text{ind},a}}{l_{\text{ind},b}} \right) \left(\frac{u_{\text{CJ},b}}{u_{\text{CJ},a}} \right) \left(\frac{\dot{\sigma}_{\text{max},a}}{\dot{\sigma}_{\text{max},b}} \right) \quad (5.3)$$

Les valeurs de ces ratios peuvent ensuite être calculées à partir de la Figure 5.15 :

$$\begin{aligned} \frac{\chi_{\text{1-Step}}}{\chi_{\text{3-Step}}} &\sim (4.12) \cdot (0.996) \cdot (0.893) \sim 3.664 \\ \frac{\chi_{\text{Detailed}}}{\chi_{\text{3-Step}}} &\sim (2.06) \cdot (1.115) \cdot (2.176) \sim 4.998 \\ \frac{\chi_{\text{Detailed}}}{\chi_{\text{1-Step}}} &\sim \frac{\chi_{\text{Detailed}}}{\chi_{\text{3-Step}}} \cdot \frac{\chi_{\text{3-Step}}}{\chi_{\text{1-Step}}} \sim 1.364 \end{aligned}$$

Les résultats obtenus montrent que si les valeurs de χ pour la chimie à une étape et la chimie détaillée sont assez proches, les différences sont importantes par rapport à la chimie à trois étapes. L'écart semble provenir des différences entre l_{ind} et $\dot{\sigma}_{\text{max}}$ entre les mécanismes. Ainsi, l'utilisation d'un terme général pour définir la stabilité ne semble pas être suffisant pour répondre à la différence entre les hauteurs critiques obtenues.

5.6 Synthèse partielle

Des simulations bidimensionnelles ont été réalisées pour évaluer l'influence de la modélisation chimique sur la structure de la détonation et ses limites d'extinction. Trois schémas cinétiques différents ont été utilisés pour modéliser un mélange stœchiométrique $\text{H}_2\text{-O}_2$ dans les conditions atmosphériques. En outre, deux configurations ont été étudiées : la propagation idéale dans un canal et la propagation non idéale dans un milieu semi-confiné où la détonation subit des pertes latérales.

La chimie à trois étapes reproduit avec précision les temps d'induction de la chimie détaillée, dans les régions de haute et basse température. La chimie à une étape restitue les temps d'induction à haute température, mais elle s'écarte sensiblement des autres modèles à basse température (Cela résulte d'une sous-estimation de plusieurs ordres de grandeurs).

Dans le cas idéal, la gamme des tailles de cellules prédites numériquement sont en accord avec les observations expérimentales, ce qui signifie que cette longueur caractéristique est très probablement déterminée par la cinétique à haute température, comme le suggèrent les relations phénoménologiques entre la taille de la cellule et la longueur d'induction, calculées à l'état vN.

La dynamique du front de détonation pour les modèles de cinétique simplifiée et la chimie détaillée sont similaires, comme le montre la pdf de la vitesse de détonation normalisée D/D_{CJ} . La chimie détaillée montre également une région plate autour de la valeur CJ, jusqu'à des valeurs de D/D_{CJ} correspondant à la température de croisement. En dessous de cette température, les temps d'induction ne sont plus comparables aux temps caractéristiques d'induction, en aval d'un front de détonation.

Les hauteurs critiques obtenues sont par ordre croissant $h_{\text{crit,Detailed}} \ll h_{\text{crit,3-Step}} < h_{\text{crit,1-Step}}$. La hauteur critique de la chimie détaillée $h_{\text{crit,Detailed}}$ est de loin la plus petite parmi les trois modèles chimiques. Bien que tous les schémas cinétiques partagent les mêmes temps d'induction et la même dynamique du choc dans la gamme des températures élevées, leurs hauteurs critiques diffèrent sensiblement ($h_{\text{crit,3-Step}}/h_{\text{crit,Detailed}} \sim 3, 33$). En revanche, la hauteur critique pour le mécanisme à une étape, $h_{\text{crit,1-Step}}$, n'est que de 20 à 40% supérieure à $h_{\text{crit,3-Step}}$. Le raisonnement sur les temps d'induction est contre-intuitif. En effet, lorsque la détonation est soumise aux pertes latérale, les températures post-chocs correspondantes sont en dessous de la température T_B . Ainsi, les temps d'induction des modèles à trois étapes et détaillés deviennent beaucoup plus grands que ceux du modèle à une étape, et la hauteur critique des modèles à trois étapes et détaillée devrait être plus grande que celle du modèle à une étape.

Une autre caractéristique qui différencie les modèles simplifiés dans cette plage de température est que, pour la chimie à trois étapes, le taux de production de radicaux diminue sensiblement et la libération de chaleur dans le mélange s'arrête brusquement. Cela contraste avec la chimie à une étape où le dépôt d'énergie se poursuit sur une plus longue échelle spatiale comme le montrent les profils de thermicité. Cependant, dans les systèmes H_2 réels, il y a un changement dans les chemins chimiques pour $T < T_B$ où les réaction en chaînes linéaires prennent le relais, convertissant partiellement les H_2 en HO_2 qui, en présence d'un nombre suffisant d'atomes de H, peuvent reconstituer une

quantité de radicaux par $\text{H} + \text{HO}_2 \rightarrow \text{OH} + \text{OH}$, ce qui entraîne finalement un emballement du mélange et un dégagement de chaleur.

L'analyse des temps d'induction de différents échantillons dans une poche de gaz imbrûlés indique que la présence de radicaux ne peut pas expliquer à elle seule la résistance aux pertes observée. Au fur et à mesure que l'hydrogène est consommé, la masse molaire augmente, ce qui entraîne une augmentation de la température plus rapide dans la zone de réaction que dans les modèles cinétiques simplifiés. Il en résulte une consommation accrue de réactifs. Néanmoins, l'énergie d'activation effective du mélange est réduite. Cet effet régularisant ne peut pas expliquer complètement l'apparition d'ondes transverses réactives.

En terme de χ , la stabilité de la structure cellulaire du mélange augmente (les valeurs de χ diminuent) comme $\chi_{\text{Detailed}} > \chi_{1\text{-Step}} \gg \chi_{3\text{-Step}}$. L'augmentation de χ (ou l'équivalent de l'énergie d'activation réduite dans le cas des modèles à une seule étape) et les instabilités associées ne sont pas suffisantes pour expliquer la hauteur critique plus élevée pour les chimies simplifiées. Cependant, les résultats en hauteur critique h_{crit} semblent bien corrélés avec les valeurs de thermicité $\dot{\sigma}_{\text{max}}$ obtenues, c'est-à-dire $\dot{\sigma}_{\text{max}}/\dot{\sigma}_{\text{max, détaillé}} \propto h_{\text{crit}}/h_{\text{crit, détaillé}}$. Cela suggère que des modèles simplifiés améliorés pourraient être développés en utilisant les profils de thermicité ainsi que les temps d'induction comme cibles d'ajustement.

A la suite de la consommation de l'hydrogène, le rapport des capacités calorifiques γ s'approche de l'unité, devenant inférieur à la limite pour laquelle des ondes de choc inertes et réactives donnent naissance à des bifurcations de choc et à de nouveaux points triples [227, 262]. La dynamique de ces instabilités, ainsi que la présence des ondes transverses réactives observées dans le cas de la chimie détaillée seraient susceptibles de fournir les rétroactions nécessaires pour favoriser la consommation des poches de gaz imbrûlés, et finalement expliquer cette plus grande résistance aux pertes.

La hauteur critique prédite avec la chimie détaillée ($h_{\text{crit}} = 6$ mm) est en bon accord avec les données expérimentales ($h_{\text{crit}} \simeq 4.6$ mm) [119], malgré le fait que les effets tridimensionnels aient été négligés. Cela plaide en faveur des capacités prédictives de la chimie détaillée par rapport à la cinétique simplifiée. Néanmoins, il est important de noter que ce résultat est peut être spécifique aux mélanges H_2 et l'extrapolation directe de ces résultats aux hydrocarbures n'est pas directement applicable. Pour ces derniers, il peut être nécessaire d'évaluer si la consommation par effets diffusifs de poches non brûlées joue un rôle. Autrement dit, ces résultats ne suffisent pas à expliquer le paradoxe énoncé par Radulescu [251] le fait que les mélanges stables donnent une hauteur critique inférieure

aux mélanges instables contrairement aux résultats expérimentaux.

Une extension naturelle ce travail serait de permettre au modèle à trois étapes d'inclure la variation de la masse molaire et le rapport des capacités calorifiques γ . En outre, l'extension de la cinétique simplifiée pour inclure la compétition entre les radicaux comme discuté dans [263] permettrait d'améliorer les capacités prédictives des modèles simplifiés.

Simulation des détonations multidimensionnelles

Sommaire

6.1	Introduction	139
6.2	Description de la configuration	141
6.3	Topologie de la détonation idéale	145
6.3.1	Configuration bidimensionnelle	147
6.3.2	Configuration tridimensionnelle	151
6.4	Profils moyens des détonations idéales	160
6.4.1	Profils du front de choc	162
6.4.2	Moyennes de variables thermodynamiques et cinétiques	163
6.4.3	Fluctuations thermodynamiques	169
6.4.4	Fluctuations des vitesses	175
6.4.5	Énergie totale des fluctuations de Chu	177
6.4.6	Échelle de Taylor	183
6.5	Topologie de la détonation non-idéale	184
6.5.1	Caractéristiques générales	185
6.6	Analyse des champs moyens des détonation non-idéales	192
6.6.1	Relation célérité courbure	192
6.7	Synthèse partielle	195

6.1 Introduction

Les détonations sont naturellement organisées selon une structure tridimensionnelle et instationnaire [76]. Dans leurs représentation tridimensionnelle, elles sont principalement formées de surface de chocs incidents et de disques de Mach, séparées par des lignes de

points triples. Les ondes transverses se développent derrière ces points triples en aval du front de détonation et se propagent perpendiculairement à la direction de propagation [264]. La Figure 6.1 présente une vue frontale de la détonation se propageant dans un tube à section rectangulaire. La comparaison illustrative entre l'expérience réalisée par Desbordes et al. [58] et une simulation numérique réalisée par RESIDENT montre les mêmes propriétés globales citées précédemment. Les lignes de points triples se propagent de façon transversale à la direction de propagation délimitant ainsi les surfaces rectangulaires de chocs incidents et de disques de Mach. La géométrie du canal affecte la structure du front en dépit des conditions de propagation non marginales considérées. L'écoulement

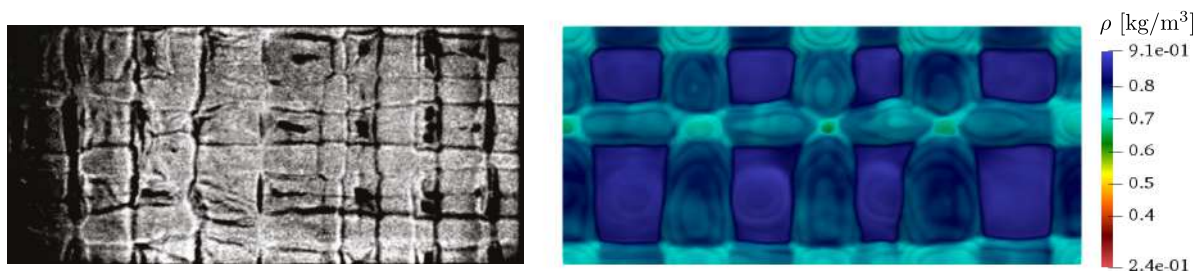


FIGURE 6.1 – Observation expérimentale et numérique d'un front de détonation dans un tube à section rectangulaire. Gauche : Adapté de Desbordes et al. [58]. Droite : Simulation à titre illustratif réalisée avec RESIDENT.

engendré en aval du front est turbulent et les tourbillons générés interagissent avec les ondes transverses. Jusqu'à présent, la plupart des études numériques sont limitées à des configurations bidimensionnelles. En outre, les limitations rencontrées par les diagnostics expérimentaux rendent difficile de distinguer la contribution des effets 3-D à la propagation. Récemment, les simulations numériques tridimensionnelles sont devenues abordables avec l'augmentation des capacités de calcul, permettent ainsi, dans une certaine mesure, d'améliorer la compréhension de la dynamique de la détonation.

Les premières simulations numériques tridimensionnelles ont été réalisées par Williams et al. [265]. Les calculs ont été axés sur la propagation de la détonation marginale dans un canal carré avec une chimie à une étape. Les auteurs ont observé que la structure du front était divisée en zones rectangulaires délimitées par les lignes de points triples. La comparaison avec les calculs bidimensionnels a révélé la présence d'une "slapping wave" et d'un champ de vorticit  plus complexe dans le cas tridimensionnel. Des  tudes exp rimentales ont  t  men es par Hanana et al. [266] afin de confirmer ces observations num riques. Ils ont identifi  un mode de propagation rectangulaire qui pr sente la slapping wave et d couvert un mode suppl mentaire nomm  "mode diagonal". Cette classification est le r sultat des trajectoires de la ligne de triple point sur le front de d tonation. D'apr s

les plaques de suies, le mouvement des lignes de points triples sont perpendiculaire dans le mode rectangulaire, alors que dans le mode diagonal, ces lignes se déplacent le long de la diagonale de la section du canal. Tsuboi et al. [267] ont effectué des simulations numériques avec une chimie détaillée et ont confirmé les observations précédentes. De plus, ils ont découvert que le mode rectangulaire peut être séparé en deux comportements distincts : en phase et en opposition de phase. Les simulations de Deiterding et al. [268] ont montré que la taille des cellules diffère entre ces modes tridimensionnels, même si leur évolution géométrique présente de nombreuses similitudes. Eto et al. [269] ont également réalisé des simulations pour un mélange hydrogène/air dans un tube rectangulaire en utilisant un modèle chimique détaillé. Ils se sont concentrés sur le mode diagonal et ont démontré que les collisions de lignes de point triples génèrent une forte explosion située au centre et dans les coins du canal. Ces collisions sont à la source des poches de gaz imbrûlés, qui sont convectées vers l’aval du front. Deledicque et Papalexandris [270] ont étudié les similitudes géométriques entre les différents modes. Dans le cas des détonations marginales, les perturbations initiales jouent un rôle majeur dans la formation de ces modes. Le mode rectangulaire a été généré par une perturbation sinusoïdale sur le profil initial du ZND. Le mode diagonal a été généré par une perturbation constante le long de la diagonale. Des simulations dans un conduit plus étroit ont montré que ces modes sont instables et évoluent naturellement vers un mode hélicoïdal [271, 272]. Tsuboi et al. [273] ont effectué une étude sur le mode hélicoïdal dans des tubes circulaires et carrés. Wang et al. [274] ont étudié l’influence de la taille du canal sur les modes de détonation. Ils montrent qu’à mesure que la taille du canal diminue, il y a un seuil en dessous duquel les modes rectangulaire et diagonal évoluent vers un mode hélicoïdal. Huang et al. [275] ont montré que la dynamique des ondes transversales et les oscillations périodiques de pression du front sont responsables des transformations de la structure de détonation du mode rectangulaire/diagonal en un mode hélicoïdal.

La description instantanée de la propagation du front 3-D est bien rapportée dans la littérature. Cependant, il est nécessaire d’apporter des comparaisons qualitatives entre les effets 2-D et 3-D afin de mettre en lumière les différences. Nous allons ainsi dans ce chapitre proposer une comparaison entre ces deux configurations dans les conditions idéales et non-idéales.

6.2 Description de la configuration

Cette section introduit les choix retenus dans cette étude. Les paramètres thermodynamiques employés sont issus des travaux de Reynaud et al. [85, 99, 249] modélisant

un mélange réactif de $\text{H}_2\text{-O}_2$ à la pression initiale $p_0 = 101.25$ kPa et à la température initiale $T_0 = 295$ K. La réaction chimique suit un modèle à une étape avec une chaleur de réaction réduite de $q/RT_0 = 28.3$. Le coefficient polytropique vaut 1.333. Ces paramètres sont issus de la littérature [203]. Le Tableau 6.1 regroupe les états CJ et vN correspondants aux paramètres précédents. La sensibilité du mélange réactif est étudiée à travers quatre énergies d'activation réduites E_a/R_uT_0 à savoir 20, 30, 38.23 et 48. Les facteurs pré-exponentiels k de la loi d'Arrhenius sont choisis afin de conserver la même demi-longueur de réaction $l_{1/2}$ entre les différents profils ZND pour chaque énergie d'activation réduite. Elle vaut ainsi $l_{1/2} = 90.79$ μm . Les profils de température et fraction massique du modèle ZND sont tracés sur la Figure 6.2 pour les différentes énergies d'activation. Elle est calibrée de façon à reproduire en 2-D, la taille de cellule expérimentale. Les valeurs des facteurs pré-exponentiels et le critère de stabilité χ de chaque énergie d'activation sont regroupés dans le Tableau 6.2. Le critère de stabilité a été calculé en utilisant la définition de Radulescu [112] en l'adaptant pour un mécanisme chimique à une étape. L'auteur a ainsi réalisé une classification de différents mélanges selon leur sensibilité à travers des observations expérimentales de la structure cellulaire. Une limite permettant de distinguer les mélanges stables des mélanges instables a été trouvée pour $\chi = 10$. Au-delà de cette valeur, les détonations sont considérées comme instables. À partir des valeurs de cette analyse, on peut ainsi conclure que nos mélanges décrits par $E_a/R_uT_0 = 38.23$ et 48 sont instables. Des simulations numériques instationnaires 1-D ont été réalisées afin

TABLE 6.1 – Paramètres CJ et vN.

D_{CJ} (m/s)	P_{vN} (bar)	P_{CJ} (bar)	T_{vN} (K)	T_{CJ} (K)
2845	17.5	34	1707	3007

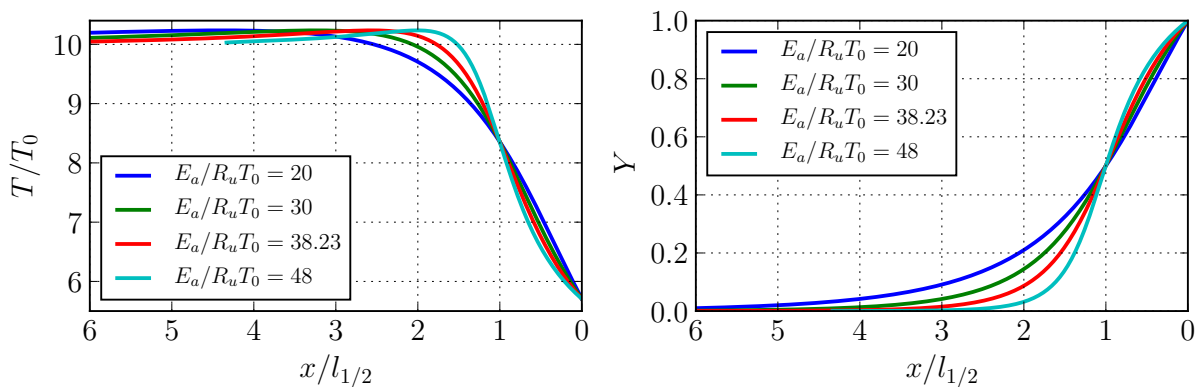


FIGURE 6.2 – Profils de température (gauche) et de fraction massique (droite) du modèle ZND pour les différentes énergies d'activation.

d'observer le comportement dynamique de la détonation. La Figure 6.3(gauche) montre

TABLE 6.2 – Facteurs préexponentiel et indice de sensibilité du mélange.

E_a/R_uT_0	k (s ⁻¹)	χ
20	8.121×10^7	2.95
30	8.121×10^7	8.32
38.23	1.100×10^7	14.49
48	8.121×10^7	26.74

l'évolution de la vitesse du front de détonation en fonction de la distance parcourue. La vitesse est adimensionnée par D_{CJ} tandis que la distance est adimensionnée par rapport à $l_{1/2}$. Les courbes présentent le comportement des différentes énergies d'activation. À $t = 0$, l'amorçage de la détonation engendre des vitesses supérieures à celle de D_{CJ} . La relaxation de cette vitesse arrive à partir d'une distance avoisinant les 500 $l_{1/2}$. Les courbes sont présentées à partir de cette distance. Pour les énergies d'activation de $E_a/R_uT_0 = 20$ et $E_a/R_uT_0 = 30$, la détonation se propage à D_{CJ} de façon stationnaire. Les deux courbes sur la figure sont ainsi des droites confondues. En revanche, les courbes de $E_a/R_uT_0 = 38.23$ et $E_a/R_uT_0 = 48$ indiquent un comportement oscillatoire voire chaotique dans l'intervalle $0.7D_{CJ} < D < 2.2D_{CJ}$. Ces oscillations sont la manifestation des instabilités non-linéaires longitudinales qui caractérisent les mélanges représentés par ces énergies d'activation. Néanmoins, la vitesse moyenne calculée pour tous les différents cas est de 2844 m/s, ce qui correspond à une déviation inférieure à 0.1% de la valeur théorique D_{CJ} (voir Tableau 6.1). Ces courbes confirment les valeurs du facteur χ avec l'existence de la limite de stabilité entre $E_a/R_uT_0 = 30$ et $E_a/R_uT_0 = 38.23$. Ces points de fonctionnement choisis dans cette étude sont positionnés par rapport à la courbe de stabilité 1-D sur la Figure 6.3 droite. Le graphique présente les énergies d'activation normalisées par rapport à T_{vN} tracées en fonction du nombre de Mach à l'état CJ. La courbe en pointillés délimite la zone stable de la zone instable [87]. Les différentes énergies d'activations sont présentées par des points et comparées à cette limite. Le point relatif à $E_a/R_uT_0 = 20$ est situé dans la zone de stabilité tandis que le point de $E_a/R_uT_0 = 30$ est situé sur la limite de stabilité. Les profils de vitesses de détonation (Figure 6.3 gauche) montrent, effectivement que ces deux énergies d'activation illustrent un comportement stable. En revanche, les énergies d'activation $E_a/R_uT_0 = 38.23$, $E_a/R_uT_0 = 48$ sont dans la zone de détonation instable avec un degré d'instabilité variable. Le point $E_a/R_uT_0 = 38.23$ est proche de la limite de stabilité. La détonation résultante sera appelée par la suite comme modérément instable. Le point $E_a/R_uT_0 = 48$ est le plus éloigné de la courbe limite. La détonation résultante sera appelée par la suite comme instable. Le mélange $H_2 + O_2$ est présenté à titre comparatif avec des degrés variables de dilutions par l'Argon. Elle montre qu'une dilution permet de passer d'un mélange instable à un mélange stable. Le point $E_a/R_uT_0 = 48$ se rapproche des

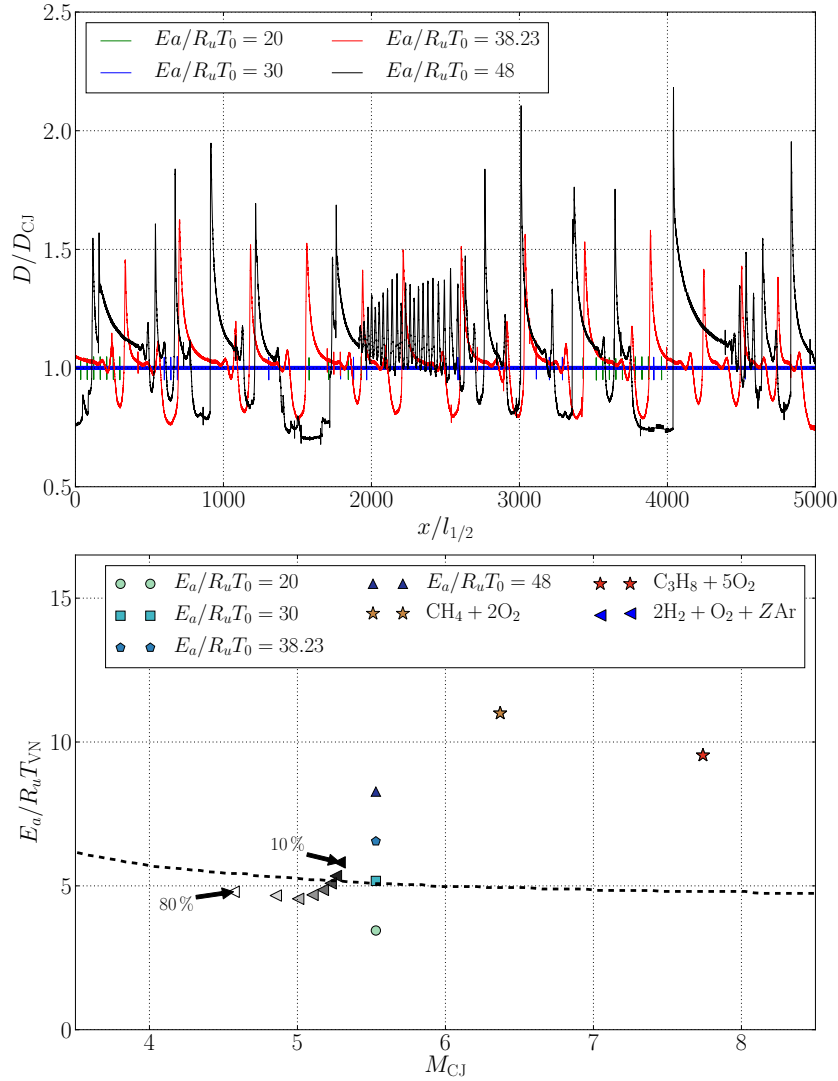


FIGURE 6.3 – Gauche : vitesse instantanée de la détonation en fonction de la distance normalisée par la demi-longueur de réaction $l_{1/2}$. Droite : représentation des énergies d'activation réduites dans le lieu de stabilité. La limite de stabilité est représentée par des traits en pointillés. Le pourcentage présente le degré de dilution à l'Argon du mélange $H_2 - O_2$.

points représentatifs des mélanges $CH_4 - 2 O_2$ et $C_3H_8 - 5 O_2$, qui peuvent être considérés comme des mélanges "très" instables, avec des structures cellulaires très irrégulières.

Des simulations bidimensionnelles ont été réalisées dans l'objectif de s'assurer que la physique de la détonation est correctement restituée pour chaque point de fonctionnement. En outre, l'analyse de la structure cellulaire permettra d'estimer la taille des cellules et leur régularité. Le domaine de calcul considéré est cartésien de dimensions $L_x \times L_y = 20 \text{ mm} \times 30 \text{ mm} = 220 l_{1/2} \times 330 l_{1/2}$. Les conditions aux limites en amont et en aval sont des conditions d'absorption tandis que les limites supérieure et inférieure sont des conditions de réflexion par symétrie. Ces dimensions permettent d'éviter toute influence

des conditions aux limites. La taille de la maille de calcul est de $\Delta x = l_{1/2}/(10 \text{ pts})$. La structure cellulaire obtenue est présentée dans la Figure 6.4 pour chaque énergie d'activation réduite. La structure obtenue pour $E_a/R_u T_0 = 20$ est considérée comme d'excellente régularité, puis $E_a/R_u T_0 = 30$ comme de bonne régularité. Ensuite, $E_a/R_u T_0 = 38.23$ est faiblement irrégulière et finalement $E_a/R_u T_0 = 48$ comme légèrement irrégulière. La valeur du coefficient polytropique est relativement grande et les bifurcations de choc responsables d'une structure irrégulière ne sont pas susceptibles de se produire [226].

Une synthèse des tailles de cellules moyennes pour chaque énergie d'activation est présentée dans le Tableau 6.3. Le rapport entre taille de cellule et longueur d'induction semble être constant avec $\mathcal{A} = \lambda/l_{1/2} \simeq 20$.

TABLE 6.3 – Taille de cellule mesurée pour chaque mélange.

$E_a/R_u T_0$	λ (mm)	$\mathcal{A} = \lambda/l_{1/2}$
20	1.91	21
30	1.98	21.8
38.23	1.85	20.4
48	1.81	20

6.3 Topologie de la détonation idéale

Cette section est consacrée aux détonations sans pertes. La configuration, qualifiée d'idéale est associée à une détonation auto-entretenu se propagent à la vitesse CJ. L'objectif est ainsi de réaliser des simulations 2-D et 3-D et d'analyser les éventuelles différences. Ces analyses s'effectueront sur des détonations marginales avec des mélanges de différentes régularités.

Le domaine de calcul retenu est 3-D, cartésien de dimensions $L_x \times L_y \times L_z = 20 \text{ mm} \times 2 \text{ mm} \times 2 \text{ mm} = 220 l_{1/2} \times 22 l_{1/2} \times 22 l_{1/2}$. Lorsque le domaine est considéré 2-D, les mailles auront une épaisseur Δz selon la direction z . La résolution employée est de 10 pts/ $l_{1/2}$. Le coût total des simulations est de 1.2 million d'heures CPU, avec des tailles de simulations allant jusqu'à 106.48 millions de mailles dans le cas 3-D. Pour les simulations 3-D, l'amorçage de la détonation s'effectue de deux manières. Puisque la détonation qui sera formée est marginale, le mode de propagation obtenu sera dépendant des conditions initiales. La Figure 6.5 présente les deux méthodes. La première consiste à porter selon la diagonale de la surface (y, z) une partie du domaine de calcul à l'état von Neumann. Cela permet d'obtenir un mode de propagation diagonal. En revanche, un amorçage avec

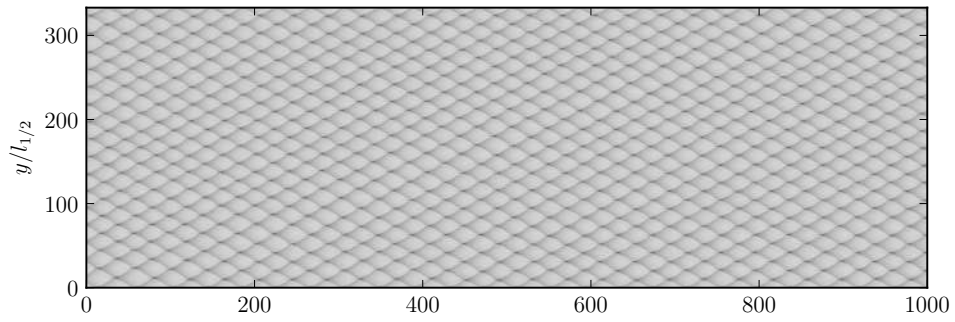
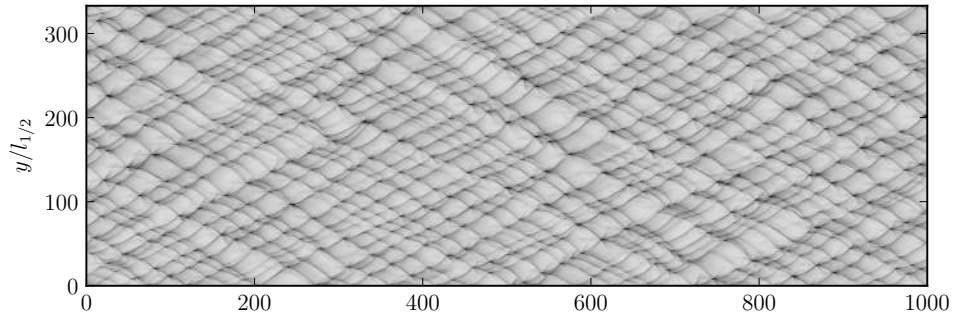
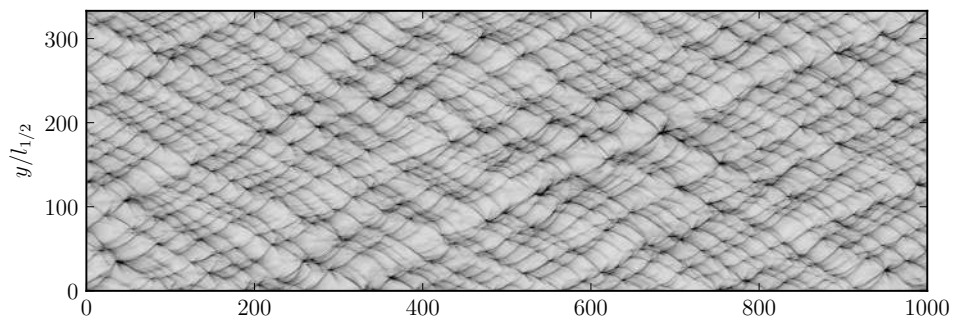
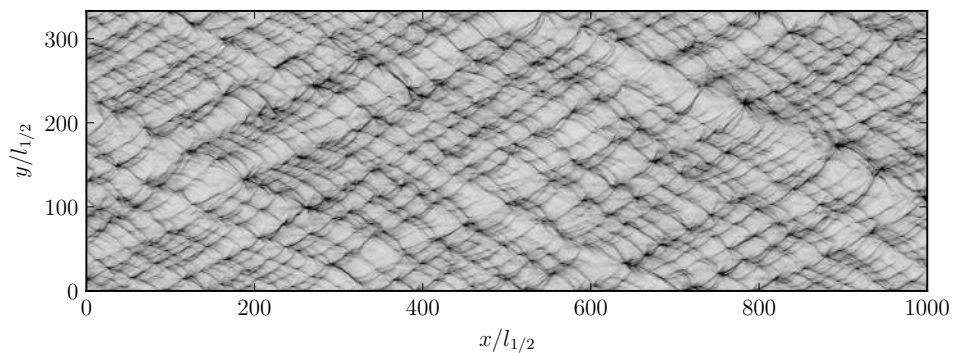
(a) $E_a/R_uT_0 = 20$ (b) $E_a/R_uT_0 = 30$ (c) $E_a/R_uT_0 = 38.23$ (d) $E_a/R_uT_0 = 48$

FIGURE 6.4 – Structure cellulaire de la détonation pour les différentes énergies d'activation réduites.

une surface rectangulaire dans le plan (y, z) permettra d'obtenir un mode de propagation rectangulaire.

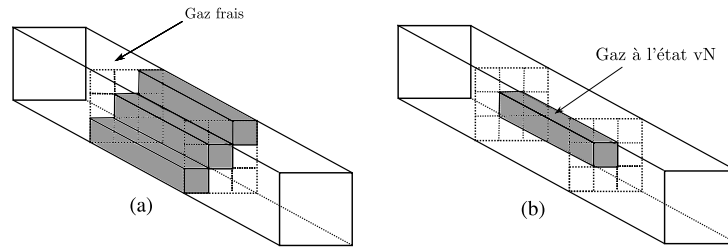


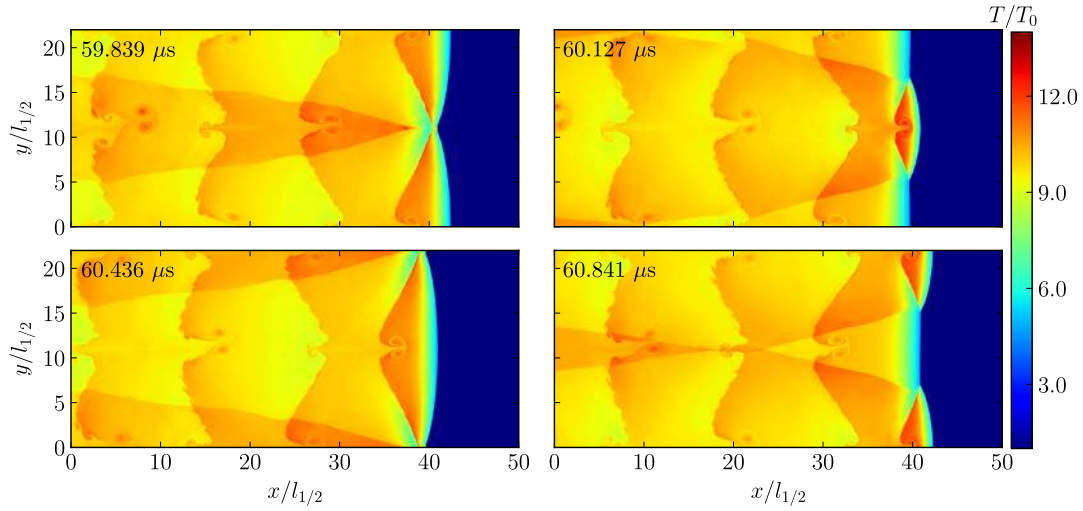
FIGURE 6.5 – Représentation schématique des conditions initiales 3D pour les deux modes de détonation pour les configurations 3-D : (a) : mode diagonal, (b) : mode rectangulaire

Dans cette section, nous allons présenter des caractéristiques générales de la détonation à travers l'analyse des champs instantanés. Une comparaison qualitative sera faite entre les deux énergies d'activation $E_a/R_u T_0 = 20$ et $E_a/R_u T_0 = 48$. L'influence de la méthode d'amorçage fera l'objet d'une analyse approfondie pour les simulations tridimensionnelles. Une comparaison quantitative sera faite en y ajoutant les deux énergies d'activations $E_a/R_u T_0 = 30$ et $E_a/R_u T_0 = 38.23$. Les différences entre les simulations 2-D et 3-D seront mises en évidence au travers de l'examen de l'équation de vorticit .

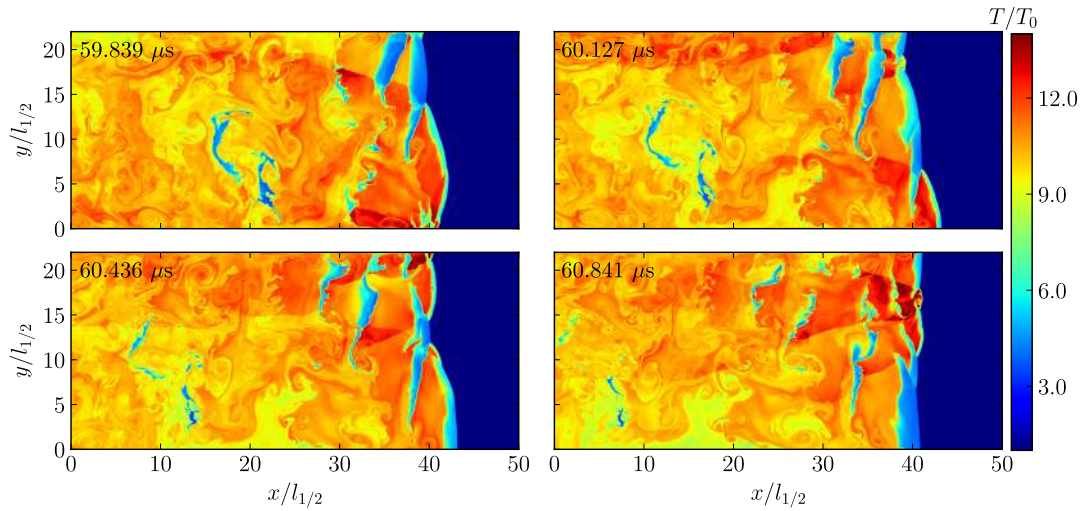
6.3.1 Configuration bidimensionnelle

La Figure 6.6 pr sente les champs de temp rature adimensionn s obtenus pour deux  nergies d'activation r duites pr sentant une d tonation r guli re avec $E_a/R_u T_0 = 20$ et irr guli re avec $E_a/R_u T_0 = 48$. La s quence d'images permet de suivre 4/5 de la formation d'une cellule. Seule une partie du domaine selon x est montr e. La structure du front ainsi que l' coulement induit en aval sont affect s par la sensibilit  du m lange. Dans le cas o  $E_a/R_u T_0 = 20$ (Figure 6.6a), la formation de la cellule commence quand deux points triples rentrent en interaction au centre du canal   $t = 59.839 \mu\text{s}$. La d tonation est alors compos e de deux disques de Mach sym triques et deux ondes transverses qui s' loignent l'une de l'autre. Les deux lignes de glissement attach es aux points triples s'enroulent aux voisinages des parois pour former des structures tourbillonnaires.   $t = 60.127 \mu\text{s}$, le front est compos  d'un disque de Mach au centre, form  par la collision des points triples et de deux chocs incidents. Les lignes de glissement sont d tach es et convect es dans les gaz br l s. Les ondes transverses interagissent avec ces lignes et cr ent une instabilit  de type Richtmyer-Meshkov, des l g res ondulations pouvant  tre observ es. Un jet form  derri re le disque du Mach est observ  au centre du canal. Le vortex vers l'avant est li  aux points triples par les lignes de glissement. Ces points triples impactent la paroi   $t = 60.436 \mu\text{s}$ et entament une course vers le centre du canal.   ce stade, le disque de Mach devient un choc incident et la cellule a atteint la moiti  de sa formation.   $t = 60.841 \mu\text{s}$, les points triples s'avancent vers le centre du canal, avec une formation de disques de Mach sur les parois.

La formation de la cellule atteint sa fin à un instant ultérieur où le champ est similaire à celui de l'instant $t = 59.839 \mu\text{s}$. L'augmentation de l'énergie d'activation réduite à



(a) $E_a/R_u T_0 = 20$



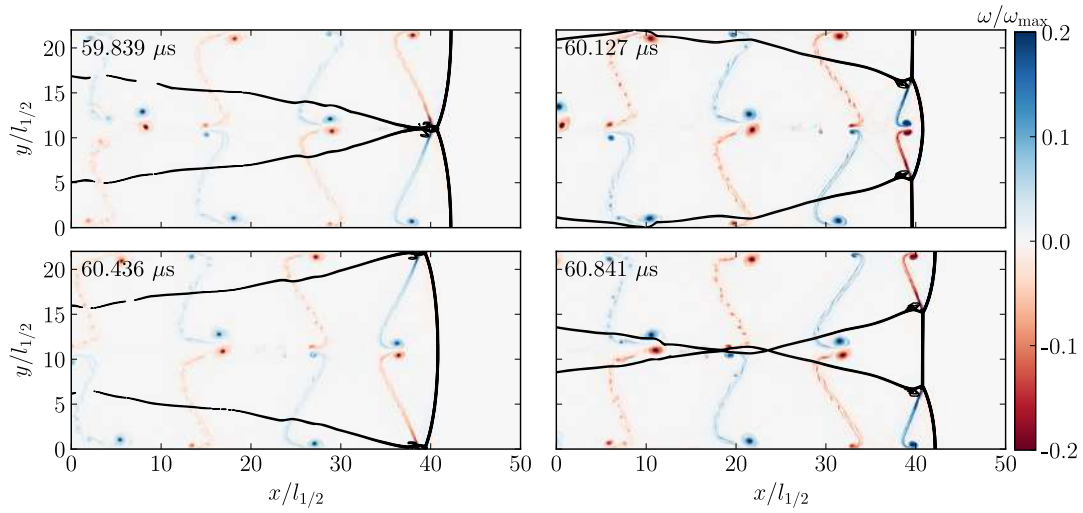
(b) $E_a/R_u T_0 = 48$

FIGURE 6.6 – Comparaison des champs de température adimensionnée T/T_0 pour deux énergies d'activation réduites. La séquence représente 4/5 d'une cellule.

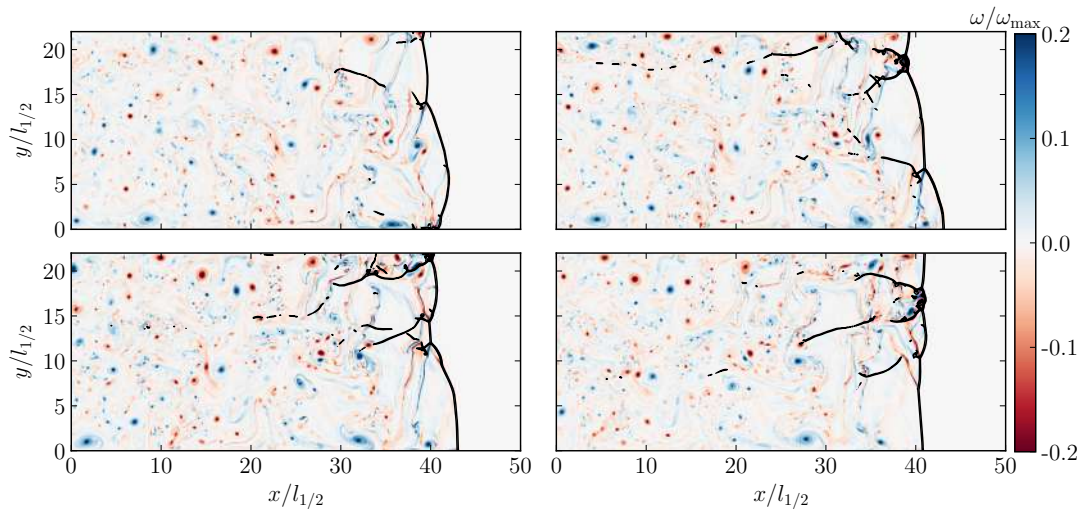
$E_a/R_u T_0 = 48$ conduit à une détonation irrégulière. La séquence de la Figure 6.6b met en évidence un écoulement complexe avec un nombre de points triples et d'ondes transverses variable. Les caractéristiques de symétrie observées dans le cas régulier sont perdues. Les lignes de glissement sont irrégulières et des poches de gaz imbrûlés sont présentes, ayant été arrachées du front et convectées en aval.

Les structures tourbillonnaires issues des simulations sont présentées sur la Figure 6.7b. Des contours de gradient de pression sont superposés aux champs de vorticit  normalis s. Les ondes transverses s'affaiblissent loin du front de d tonation allant en-dessous du seuil des contours. Une pr sence accrue de structures tourbillonnaires est engendr e

par les instabilités du front de détonation. L'équation de vorticité pour un écoulement



(a) $E_a/R_u T_o = 20$



(b) $E_a/R_u T_o = 48$

FIGURE 6.7 – Comparaison des champs de vorticité normalisée, avec des contours de gradient de pression pour deux énergies d'activation. La séquence présente 4/5 d'une cellule.

bidimensionnel compressible peut se mettre sous la forme suivante :

$$\frac{D\omega}{Dt} = \frac{1}{\rho^2} \underbrace{\nabla\rho \times \nabla p}_{\omega_b} - \underbrace{\omega \nabla \cdot \vec{u}}_{\omega_c} + \omega_d \quad (6.1)$$

où les termes de transport dans la partie droite de l'équation 6.1 sont respectivement, le couple barocline ω_b , l'expansion volumétrique ω_c et les effets visqueux ω_d . Il est important de souligner que puisque les équations d'Euler ont été utilisées pour résoudre l'écoulement, les effets visqueux ne sont pas pris en compte. Cependant, une estimation peut être faite avec une viscosité cinématique constante $\nu = 1.5 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$, $\omega_d = \nu \Delta \omega$. En procédant

comme Zhu et al. [276], l'importance relative de chaque contribution sera évaluée de la façon suivante :

$$\bar{\omega}_i(x) = \frac{1}{L_y} \int_0^{L_y} |\omega_i(x, y)| dy \quad (6.2)$$

puis adimensionnalisée par $(D_{CJ}/l_{1/2})^2$. La Figure 6.8 illustre ces différents termes de

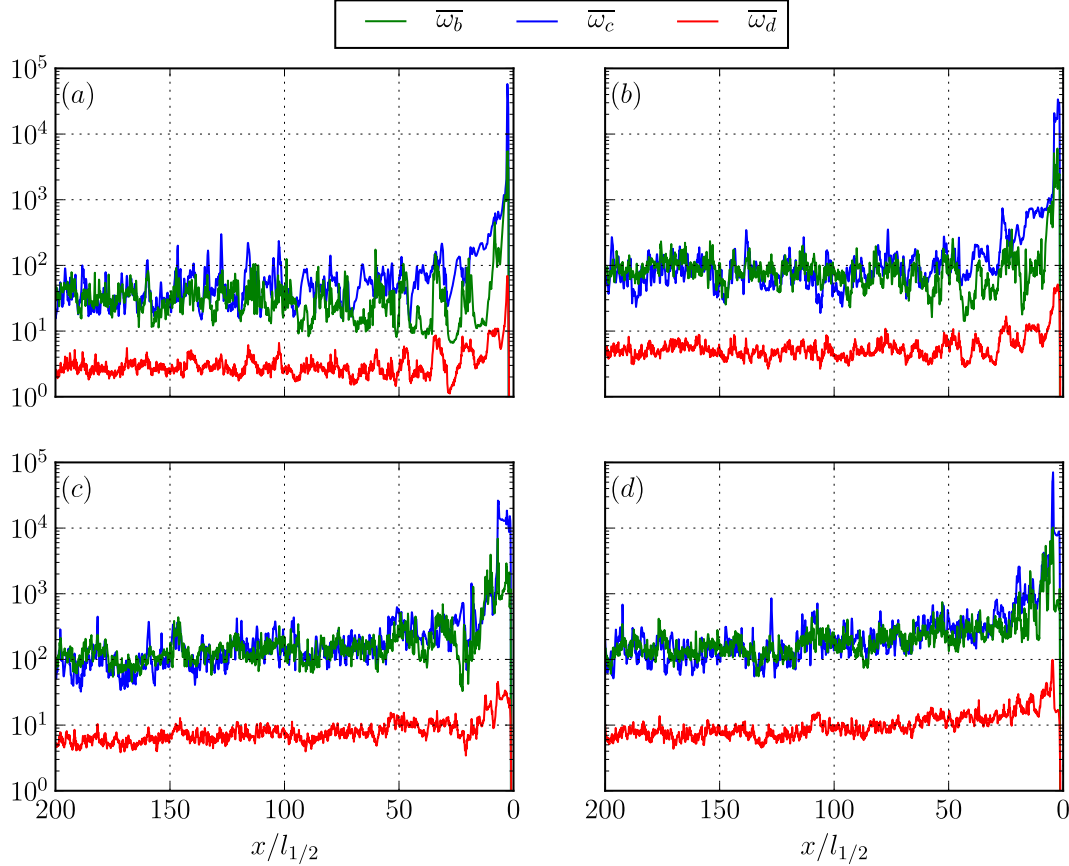


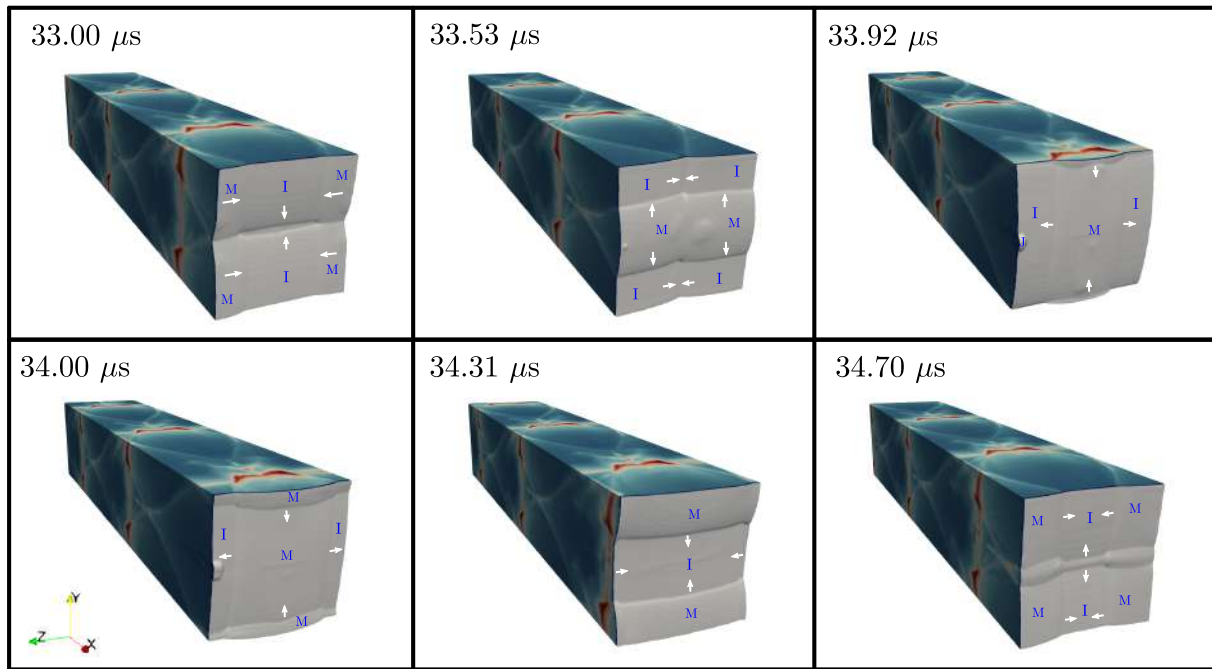
FIGURE 6.8 – Évolution des termes de transport de vorticité. Une moyenne selon la direction y des valeurs absolues est réalisée. Les quatre énergies d'activation sont présentées par (a) $E_a/R_u T_0 = 20$, (b) $E_a/R_u T_0 = 30$, (c) $E_a/R_u T_0 = 38.23$, (d) $E_a/R_u T_0 = 48$.

productions de vorticité. D'une manière générale, ces termes de transport ont un comportement similaire. Les amplitudes décroissent en s'éloignant du choc jusqu'à atteindre des valeurs stationnaires. Ces grandeurs deviennent plus élevées avec l'augmentation de l'irrégularité du mélange. Pour les énergies d'activation réduites $E_a/R_u T_0 = 20$, $E_a/R_u T_0 = 30$ et $E_a/R_u T_0 = 38.23$, le terme lié à l'expansion volumétrique est plus important que le terme barocline, proche du choc jusqu'à $25 l_{1/2}$. Puis le couple barocline et l'expansion volumétrique sont du même ordre de grandeur. Le terme de dissipation d'origine visqueuse serait alors d'un ordre de grandeur inférieur. Cela signifie que la présence des lignes de glissement, leur interaction avec les ondes de choc transverses, la collision des ondes de choc transverses, les interactions choc-vortex et l'expansion globale des produits de détonation dans la zone de réaction sont les principaux mécanismes de production de vorticité [83].

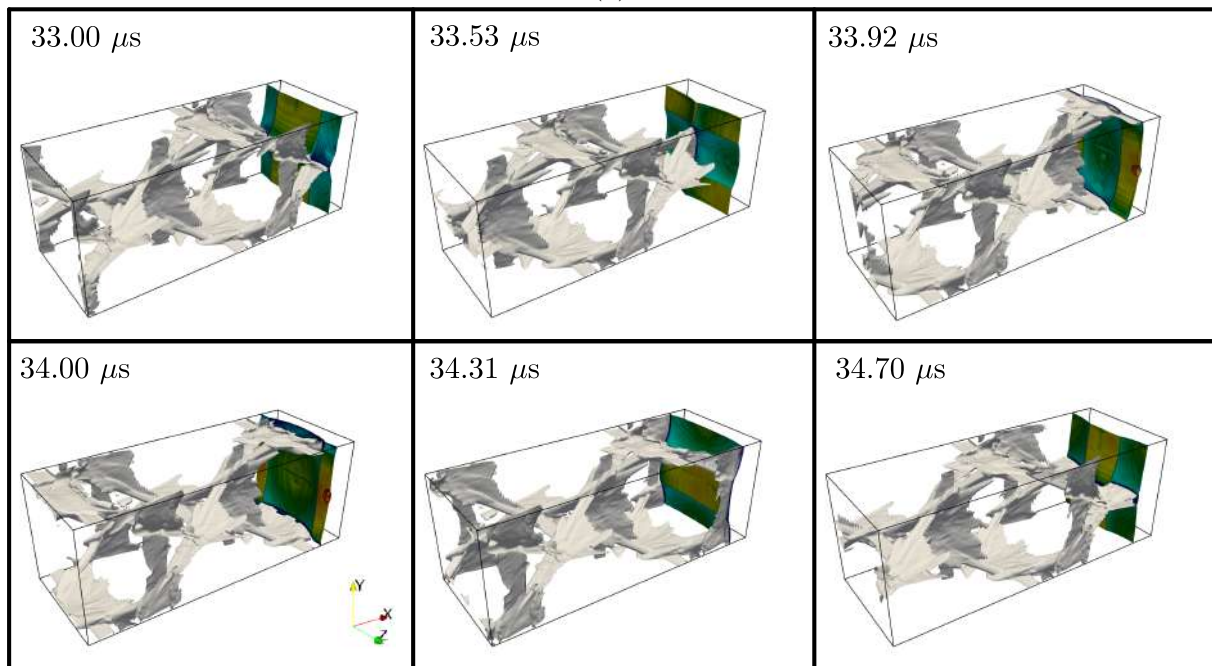
Dans les conditions de détonation, les termes de couple barocline et d'expansion volumétrique sont prépondérants et du même ordre de grandeur. Les résultats diffèrent avec la configuration de la transition à la détonation, à la suite de l'interaction d'une onde de choc avec une flamme, où l'importance relative de ces deux termes varie avec le gradient réactif initial. Le terme de diffusion de la vorticit   ne peut   tre n  anmoins compl  tement n  glig  , notamment proche du plan sonique (basse densit   et haute temp  rature) o   il pourrait jouer un r  le dans le cas o   le mod  le Navier-Stokes serait utilis  .

6.3.2 Configuration tridimensionnelle

La Figure 6.9 illustre le front de d  tonation et la structure cellulaire engendr  e lors de sa propagation. Le front est mis en   vidence par les iso-contours en gris sur la vue de face (6.9a) et la structure cellulaire par des iso-contours de l'historique du maximum de pression sur la vue de derri  re (6.9b). L'  coulement r  sulte d'un amorcage rectangulaire et d'une   nergie d'activation r  duite $E_a/R_u T_0 = 20$. On distingue les propri  t  s globales d'une d  tonation multidimensionnelle.    $t = 33.00 \mu\text{s}$, le front est s  par   en six surfaces d  limit  es par des lignes de points triples. Elles d  limitent des surfaces de disque de Mach ou de chocs incidents, not  s respectivement **M** et **I**, selon la notation de Williams et al. [265]. Les fl  ches en couleur blanche montrent la direction de propagation des lignes de points triples. Les deux lignes horizontales se rencontrent au centre du canal, tandis que les lignes verticales proches des parois se propagent vers l'int  rieur l'une vers l'autre. Sur la surface lat  rale gauche du canal, la rencontre des deux lignes de points triples marque la fin du cycle d'une cellule. Les surfaces avoisinantes sont alors ici comme des disques de Mach.    l'instant $t = 33.53 \mu\text{s}$, ces lignes vont inverser leurs trajectoires et s'  loigner l'une de l'autre, formant sur la paroi gauche le d  but d'une cellule. Les zones not  es initialement **M** deviennent alors des chocs incidents **I** et la surface g  n  r  e apr  s la rencontre de ces lignes de points triples devient une surface de disque de Mach **M**. Les lignes de points triples verticales se rencontrent pour fermer la cellule visible sur la paroi sup  rieure du canal.    $t = 33.92 \mu\text{s}$, ces lignes se sont d  j   r  fl  chies et se propagent dans la direction oppos  e. La surface engendr  e par ce mouvement devient alors de type **M**.    ce stade de propagation, les lignes de points triples horizontales impactent les parois sup  rieure et inf  rieure du canal. Elles sont alors r  fl  chies par les parois pour se propager dans la direction oppos  e    $t = 34.00 \mu\text{s}$ laissant sur les parois des traces souvent appel  es "slapping waves" [277].    $t = 34.00 \mu\text{s}$, sur la paroi de gauche, la formation de la cellule conna  t sa deuxi  me phase. Les lignes de points triples verticales continuent    s'  loigner l'une de l'autre jusqu'   impacter les parois    l'instant $t = 34.31 \mu\text{s}$. Le front est alors s  par   par trois surfaces, deux surfaces de Mach **M** et une surface incidente **I**.    l'instant



(a)



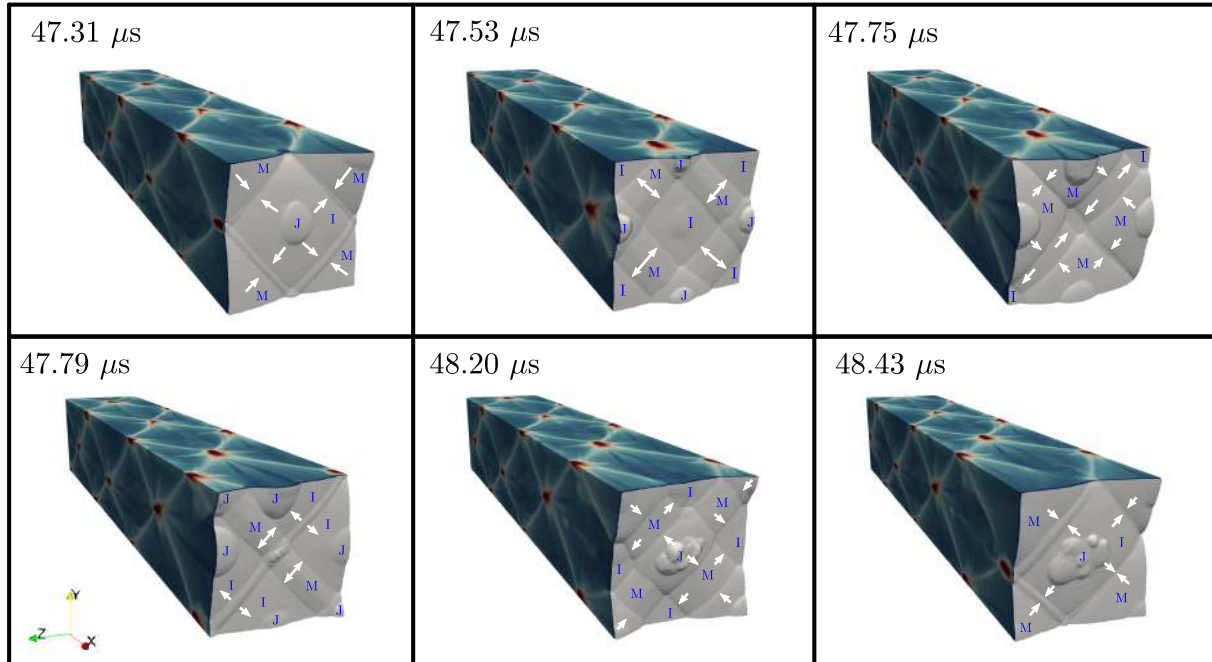
(b)

FIGURE 6.9 – Contour du front de détonation (a) et de la structure cellulaire engendrée par la propagation des lignes de points triples (b). L'énergie d'activation réduite de la simulation est $E_a/R_u T_0 = 20$. La simulation est amorcée par un mode rectangulaire.

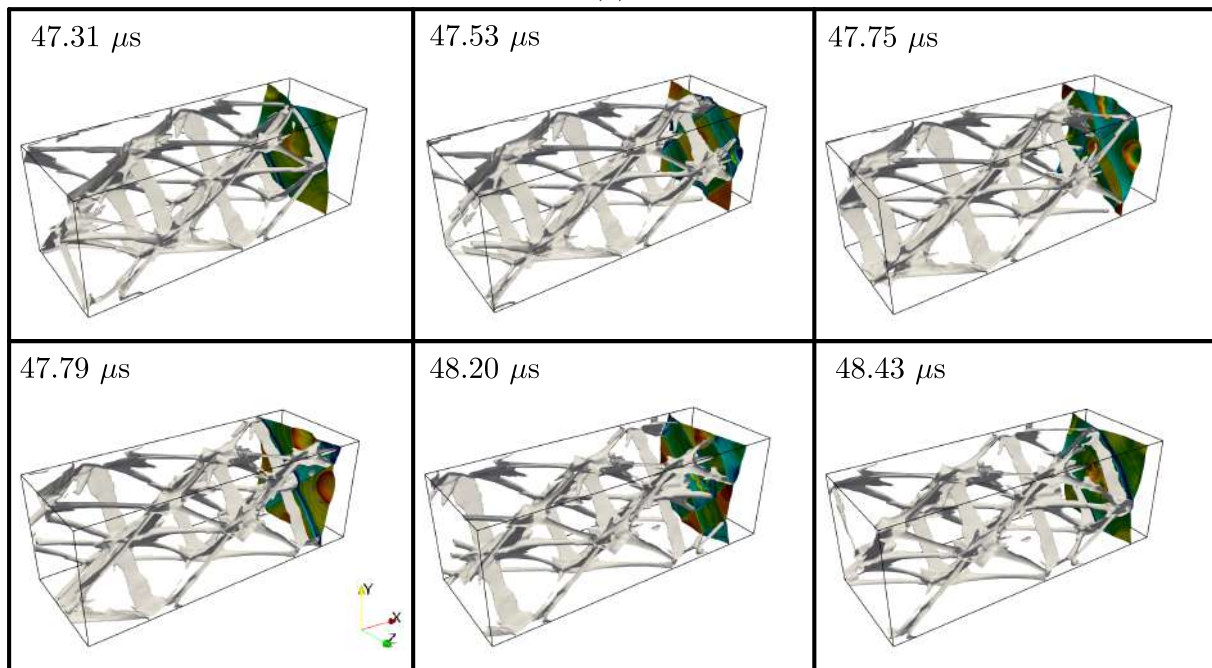
$t = 34.70 \mu\text{s}$, le cycle recommence avec une ressemblance avec l'instant $t = 33.00 \mu\text{s}$. Il est à noter que sur cet instant, deux "slapping waves" sont visibles sur les surfaces supérieure et latérale dans l'historique des maximum de pression.

Les contours présentés dans la vue de derrière (6.9b) montrent la forme tridimension-

nelle d'une cellule de détonation lors d'une propagation avec un mode rectangulaire. On y distingue alors une forme d'octaèdre dont la rencontre de deux lignes de points triples forment les arrêtes et les sommets sont les quatre coins du canal et deux au centre. Les arrêtes qui forment la base des deux pyramides sont les "slapping waves". Le résultat de



(a)



(b)

FIGURE 6.10 – Contour du front de détonation (a) et structure cellulaire engendrée par la propagation des lignes de points triples (b). L'énergie d'activation réduite de la simulation est $E_a/R_u T_0 = 20$. La simulation est amorcée par un mode diagonal.

l'initialisation diagonale est présenté sur la Figure 6.10. La séquence de formation d'une

cellule est ainsi présentée. La structure du front dans ce mode semble bien plus complexe que dans le mode rectangulaire. En effet, les lignes de points triples se propagent d'une manière diagonale à la surface du canal. À $t = 47.31 \mu\text{s}$, le front de détonation est composé de cinq surfaces délimitées par des lignes de points triples qui forment un losange. Ces surfaces sont de la même famille que dans le cas rectangulaire à savoir des surfaces de Mach **M** et de choc incident **I**. À ce stade de l'écoulement, la surface centrale est de type **I** tandis que les autres sont de type **M**. Un jet est formé au centre du canal noté **J**. L'analyse de la trajectoire des lignes de point triples sur les parois latérales du canal montre que le cycle de formation de la cellule vient de se terminer sur une rencontre de deux points triples au centre de chaque paroi. Un nouveau cycle est ainsi entamé à $t = 47.53 \mu\text{s}$ après la réflexion des lignes de points triples qui se propagent dans une direction opposée à l'instant précédent. Le front de détonation est maintenant composé de 13 surfaces. Les surfaces coincées entre les lignes de points triples sont de type **M** et celles entre les lignes de point triples et la paroi sont de type **I**. Au centre de chaque paroi, un jet est formé par la rencontre précédente des deux lignes de points triples. À $t = 47.75 \mu\text{s}$, la formation des cellules arrive à moitié du parcours. Deux lignes de points triples rentrent en impact formant une seule ligne diagonale qui relie le coin supérieur gauche et le coin inférieur droit. Les lignes opposées se propagent l'une vers l'autre réduisant la surface incident **I** sur les coins droit supérieur et gauche inférieur. Les jets formés précédemment continuent à croître et à perturber le front. À $t = 47.79 \mu\text{s}$, les lignes de point triples qui ont subi une collision précédemment suivant la diagonale se sont réfléchis et s'éloignent l'une de l'autre. L'aire entre ces précédentes devient de type **M** et des jets sont formés aux niveau des coins. Le front est alors composé de six jets bien visibles. Les lignes de points triples opposées se rencontrent alors pour former une ligne diagonales entre les coins haut droite et bas gauche. À $t = 48.20 \mu\text{s}$ ces lignes sont réfléchis et se propagent dans des directions opposées. À ce stade de l'écoulement, le front est composé de 13 surfaces réparties en surfaces **I** et **M**. La formation de la cellule atteint 3/4 de son achèvement avec un léger déphasage entre la paroi latérale et supérieure. En effet, l'historique des points triples qui se sont propagées sur la paroi latérale et supérieure montre une structure cellulaire asymétrique par rapport à l'axe central du canal. Cet effet est plus marqué à l'instant $t = 48.43 \mu\text{s}$ ou les lignes de point triples ne semblent pas se rencontrer au centre de chaque paroi du canal. Les lignes de points triples qui forment le losange à cet instant ne sont plus de même longueur. Il est a noter qu'au centre du canal, un important jet **J** à $t = 47.79 \mu\text{s}$ croit jusqu'à $t = 48.43 \mu\text{s}$.

Les contours présentés dans la vue de derrière (Figure 6.10b) montrent la forme tridimensionnelle d'une cellule de détonation lors d'une propagation avec un mode diagonal. On y distingue alors une forme d'octaèdre dont la rencontre de deux lignes de points triples

forment les arrêtes. Les sommets sont de quatre sur le centre de chaque paroi et deux au centre du canal.

La Figure 6.11 présente une comparaison entre les résultats des précédentes simulations numériques et les expériences réalisées par Hanana et al. [266]. La structure cellulaire obtenue est comparée entre les différents cas du mode rectangulaires et du mode diagonal. Les trois cas (Ra), (Rab) et (Rb) correspondent respectivement aux modes rectangulaire en phase, partiellement déphasé et en opposition de phase. Ils sont reconnaissables à la position de la "slapping waves". En effet, lorsque cette onde impacte la parois au centre de la cellule, le mode rectangulaire sera considéré en phase. Cela signifie que toutes les "slapping waves" impactent les quatre parois du canal simultanément. Le mode rectangulaire partiellement déphasé est rencontré lorsque la "slapping wave" impacte la paroi entre le milieu de la cellule et les deux extrémités. Finalement, le mode rectangulaire déphasé est celui pour lequel la slapping wave impacte la parois à la fin et au début de la formation de la cellule. Quant au mode diagonal, cette onde est absente puisque les lignes de points triples impactent les coins en se propageant d'une manière diagonale sur le front de détonation. Pour les mélanges non réguliers, l'influence des conditions initiales sur le

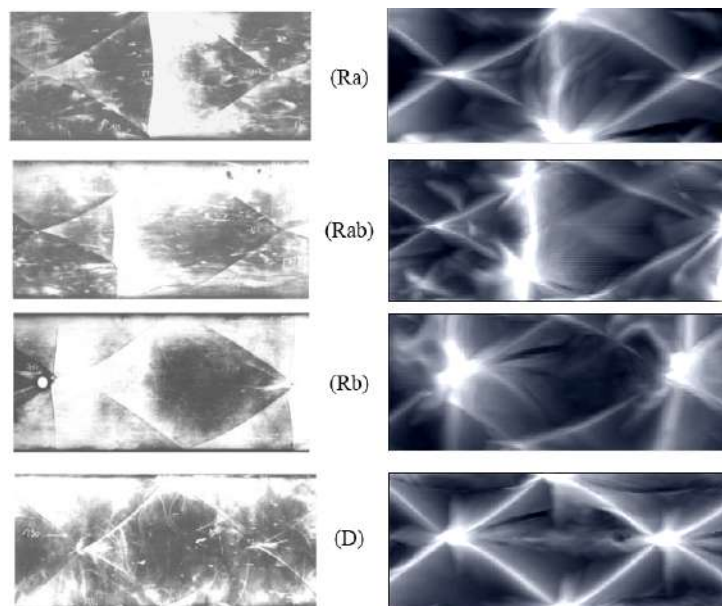
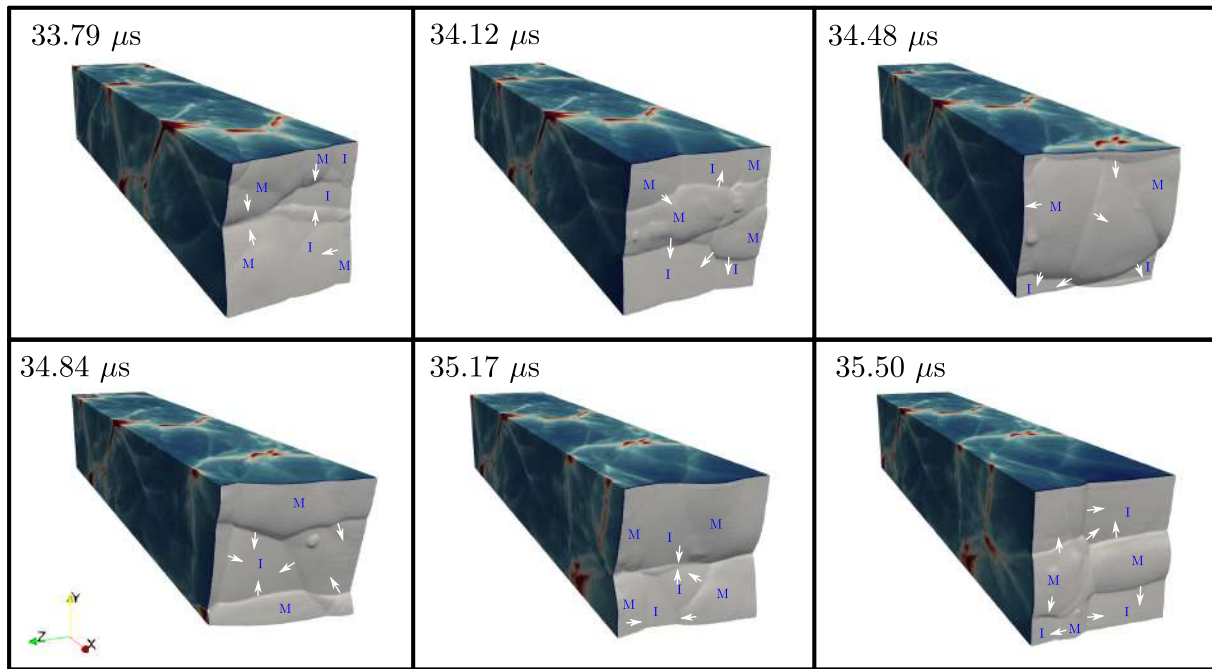
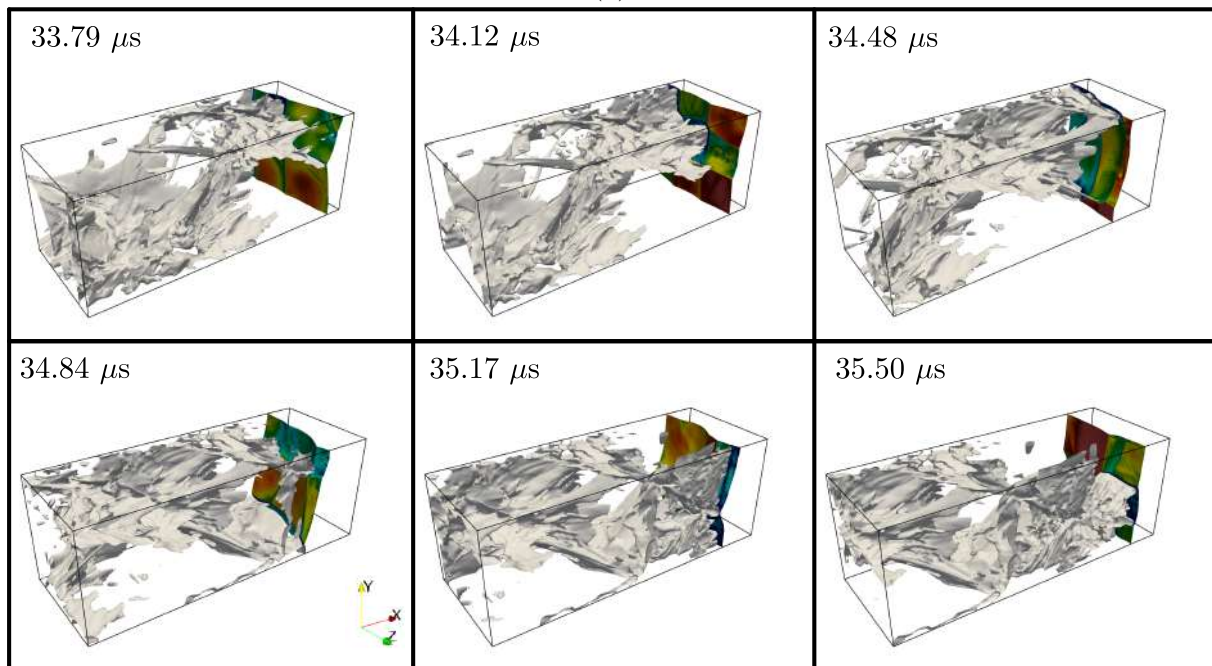


FIGURE 6.11 – Comparaison de la structure cellulaire entre la simulation (droite) et les expériences réalisées par Hanana et al. [266] (gauche). Les cas : (Ra), (Rab), (Rb) et (D) correspondent respectivement aux modes : en phase, partiellement déphasé, en opposition de phase et diagonal.

mode de propagation semble s'estomper. Les Figures 6.12 et 6.13 présentes des séquences de propagation pour un mélange instable d'énergie d'activation $E_a/RT_u = 48$. Les lignes de points triples se propagent d'une façon plus chaotique sur le front alternant ainsi entre des surfaces de disque de Mach et des surfaces de chocs incidents. La structure cellulaire



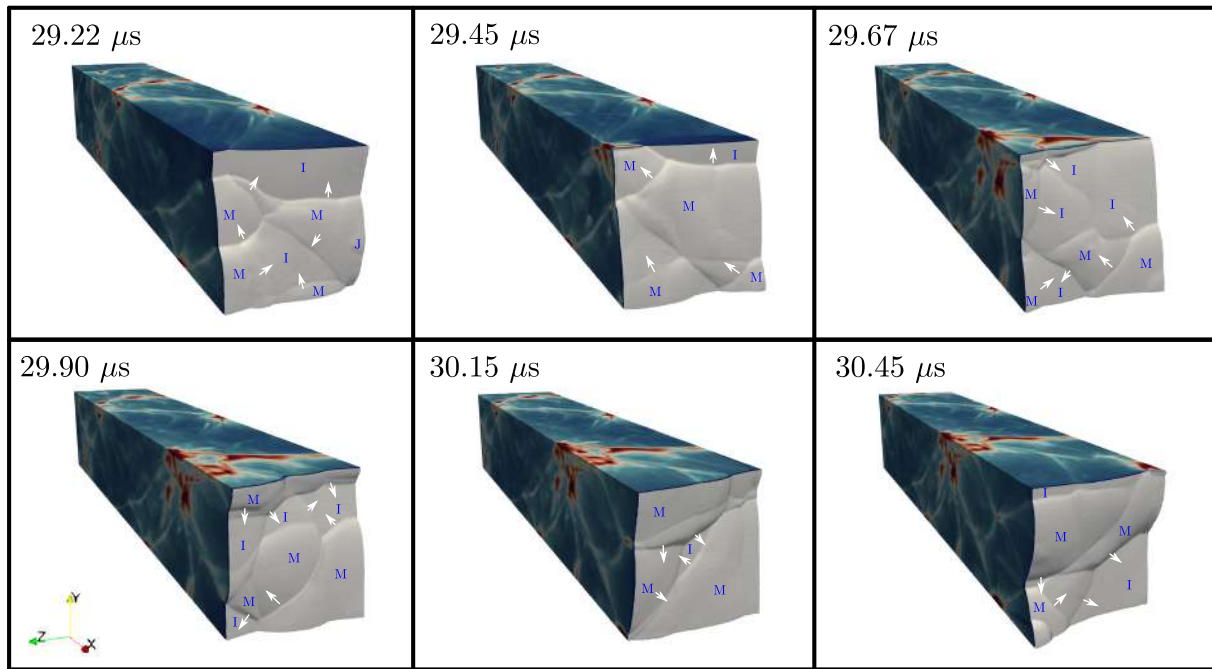
(a)



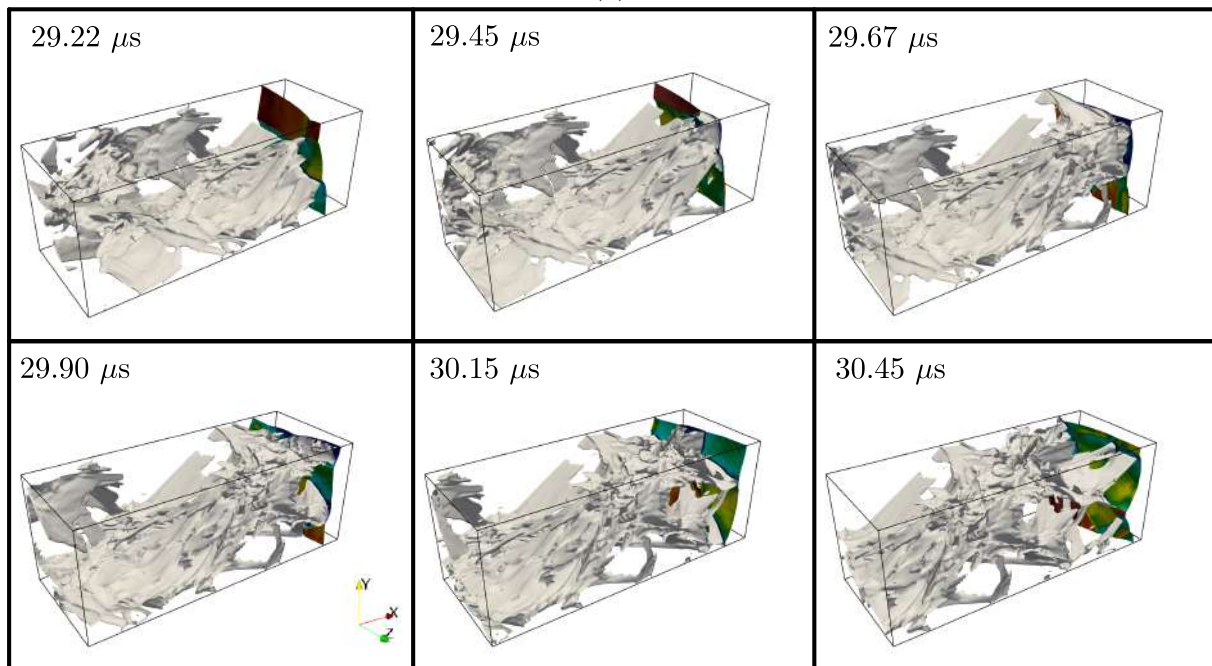
(b)

FIGURE 6.12 – Contour du front de détonation (a) et de la structure cellulaire engendrée par la propagation des lignes de points triples (b) pour une énergie d'activation réduite $E_a/R_u T_0 = 48$ pour chaque initialisation. La simulation est amorcée par un mode rectangulaire.

engendrée n'est plus régulière comme l'atteste l'historique des maximums de pression sur les parois. Ces effets sont d'autant plus marquants sur la vue de derrière avec la trajectoire des lignes de points triples (voir comparaison entre les Figures 6.12b et 6.13b). La structure tourbillonnaire derrière le front de détonation est mise en évidence dans la Figure 6.14 pour



(a)



(b)

FIGURE 6.13 – Contour du front de détonation (a) et de la structure cellulaire engendrée par la propagation des lignes de points triples (b) pour une énergie d'activation réduite $E_a/R_u T_0 = 48$ pour chaque initialisation. La simulation est amorcée par un mode diagonal.

les quatre énergies d'activation. Les champs instantanés sont des iso-surfaces du critère Q qui correspond au second invariant du gradient de vitesse. Ce terme, introduit par Hunt et al. [278] est défini par l'expression $(\Omega_{ij}^2 - S_{ij}^2)/2$, où Ω_{ij} et S_{ij} sont respectivement, les parties antisymétrique et symétriques du tenseur des gradients de vitesse. Elles représentent d'une part les composantes de rotation solide et d'autre part les déformations. On peut également

distinguer la formation de jets, issus de la collision de quatre points triples ou de deux lignes de points triples au niveau des parois et des coins. Les tourbillons sont alors présentés par les iso-contours de $Q_{\text{iso}} = 7 \times 10^{-3} Q_{\text{max}}$. Pour les quatre mélanges, ces structures se développent très rapidement derrière le front. L'instabilité du mélange est un facteur important dans la génération des tourbillons. Le mélange régulier à $E_a/R_u T_0 = 20$ permet de distinguer le mécanisme responsable de la formation des structures à grandes échelles. En effet, les nappes de glissement présentes derrière les lignes de points triples semblent s'enrouler derrière le front pour former des tourbillons. Des valeurs positives indiquent la présence de structures tourbillonnaires. Bien que le mélange $E_a/R_u T_0 = 30$ décrive une détonation stable, les structures tourbillonnaires engendrées sont plus importantes que dans le cas $E_a/R_u T_0 = 20$. Ceci est dû à un nombre plus important de points triples avec l'augmentation de la sensibilité à la température du mélange. Les amplitudes des ondes transverses sont d'autant plus importantes. L'interaction des structures tourbillonnaires avec les ondes transverses va engendrer des plus petits tourbillons.

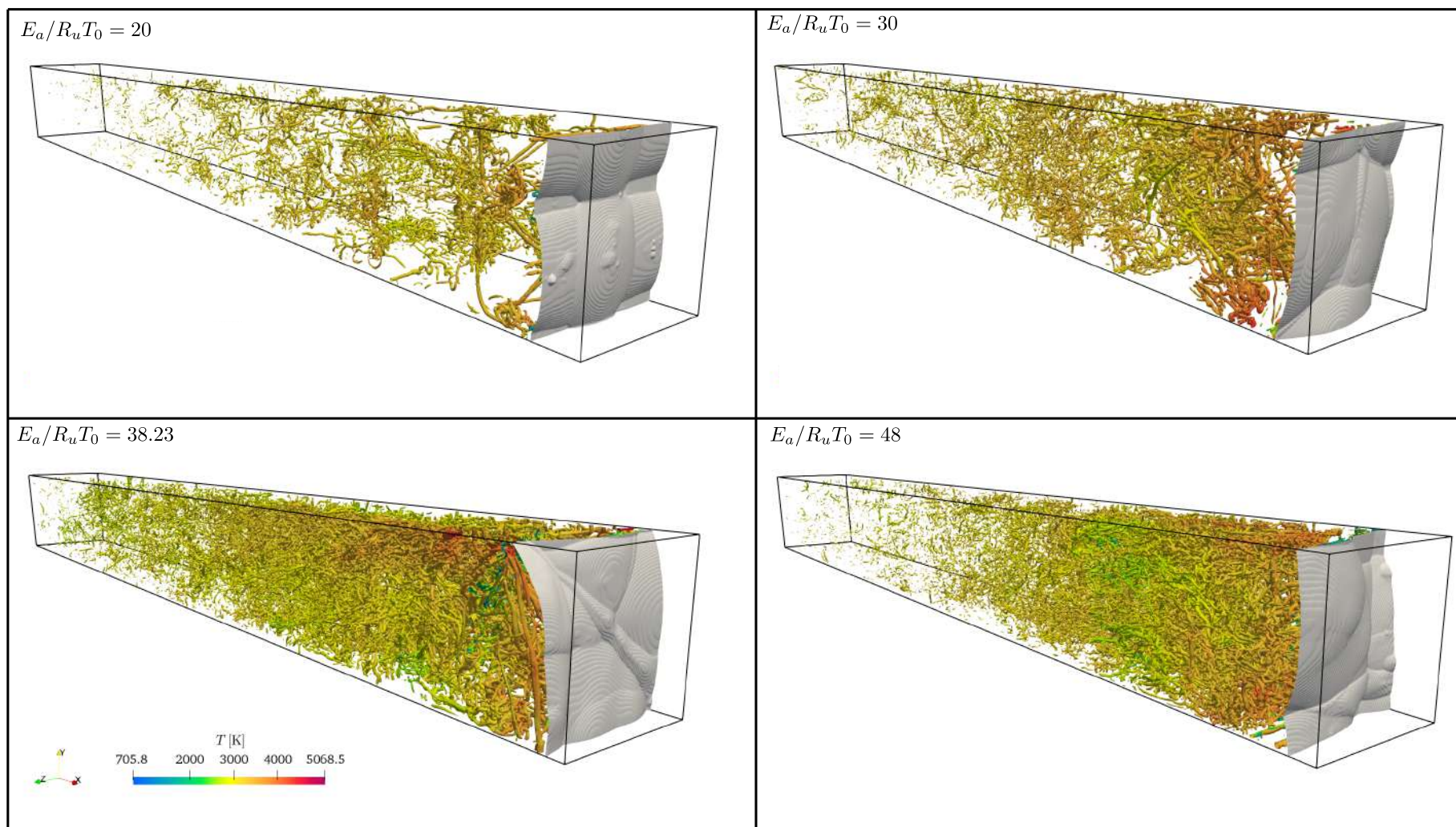


FIGURE 6.14 – Visualisation du front de détonation et de la structure tourbillonnaire engendrée pour les énergies d'activation $E_a/R_u T_0 = 20, 30, 38.23, 40$. Iso-surface du critère Q avec $Q_{\text{iso}} = 7 \times 10^{-3} Q_{\text{max}}$ coloré par la température.

Les mécanismes régissant la génération de ces structures tourbillonnaires dans le cas 3-D sont étudiés à travers l'analyse de l'équation de vorticit . Cette  quation s' nonce dans le cas tridimensionnel sous la forme vectorielle suivante :

$$\frac{D\vec{\omega}}{Dt} = \underbrace{\frac{1}{\rho^2} \nabla \rho \times \nabla p}_{\omega_b} - \underbrace{\omega(\nabla \cdot \vec{u})}_{\omega_c} + \underbrace{(\omega \cdot \nabla) \vec{u}}_{\omega_s} + \omega_d \quad (6.3)$$

Les termes rencontr s sont similaires   ceux de l' quation 6.1 dans le cas 2-D   savoir, le couple barocline ω_b , l'expansion volum trique ω_c et la diffusion de la vorticit  ω_d auquel s'ajoute la d formation des tubes de vorticit  ω_s dans le cas 3-D. Ce dernier met en  vidence deux m canismes, appel s respectivement l' tirement du vortex et la rotation (ou basculement) du vortex suivant son axe. Dans le cadre de la dynamique de la turbulence, ce m canisme est identifi  comme responsable du transfert d' nergie vers les petites  chelles. La norme associ e   la moyenne de ces termes est trac e sur la Figure 6.15 en fonction de la distance au choc. Le front de d tonation est situ    la limite droite du domaine. Les termes sont  valu s de la fa on suivante :

$$\bar{\omega}_i(x) = \frac{1}{L_y L_z} \int_0^{L_y} \int_0^{L_z} |\omega_i(y, z)| dy dz \quad (6.4)$$

Le terme visqueux est estim  en consid rant que la viscosit  est constante $\omega_d = \nu \Delta \omega$, avec $\nu = 1.5 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$, afin d'en avoir un ordre de grandeur.

Le terme li    l'expansion volum trique ω_c suit un comportement analogue   celui observ  dans le cas 2-D. Le maximum est atteint proche du choc, suivie d'une d croissance rapide puis une diminution lente en s' loignant du front de choc. Le terme li    ω_s suit le m me comportement que ω_c montrant ainsi l'importance de la d formation dans le cas 3-D. Le moment barocline montre un comportement diff rent des r sultats 2-D o  une d croissance importante est observ e   mesure que l'on s' loigne du choc. Ce terme devient du m me ordre de grandeur que celui li  aux effets visqueux.

6.4 Profils moyens des d tonations id ales

Nous avons montr    partir des analyses pr c dentes que l' coulement est fortement instationnaire avec des fluctuations importantes. Il convient alors de s'interroger sur la forme moyenne de la d tonation. La connaissance de la position instantan e du choc pr curseur est une information importante qui permet de r aliser le calcul. En effet, et comme indiqu  dans la Section 3.2.12, le calcul des moyennes de Favre est conditionn 

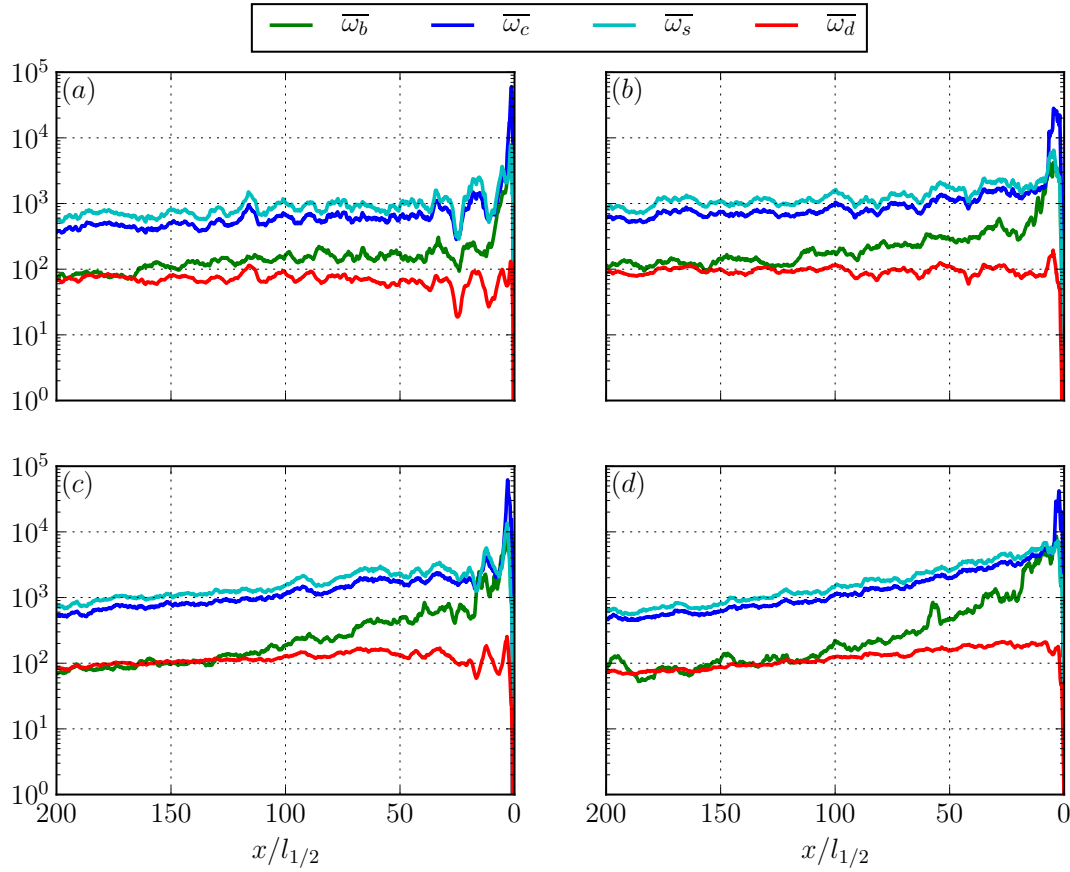


FIGURE 6.15 – Évolution de la norme des termes de transport de vorticit  3-D. Une moyenne dans le plan (x, y) des valeurs absolues est r alis e. Les quatre  nergies d'activation sont pr esent es : (a) $E_a/R_u T_0 = 20$, (b) $E_a/R_u T_0 = 30$, (c) $E_a/R_u T_0 = 38.23$, (d) $E_a/R_u T_0 = 48$.

par la position instantan e du choc pr e-curseur, de la mani re suivante :

$$\bar{G}(x, y, z) = \frac{1}{T} \int_0^T G(x - x_s(y, z, t), y, z, t) dt \quad (6.5)$$

avec $x_s(y, z, t)$ la position locale et instantan e de la surface du choc. Puis dans les configurations "canal", des moyennes spatiales sont  galement effectu es de la mani re suivante :

$$\bar{\bar{G}}(x) = \frac{1}{L_y L_z} \int_0^{L_y} \int_0^{L_z} \bar{G}(x, y, z) dy dz \quad (6.6)$$

On utilisera les notations suivantes : $u'' = u - \tilde{u}$, $\tilde{u} = \overline{\rho u / \rho}$, $\widetilde{u''^2} = \overline{(u - \tilde{u})^2}$ et $\overline{p'^2} = \overline{(p - \bar{p})^2}$.

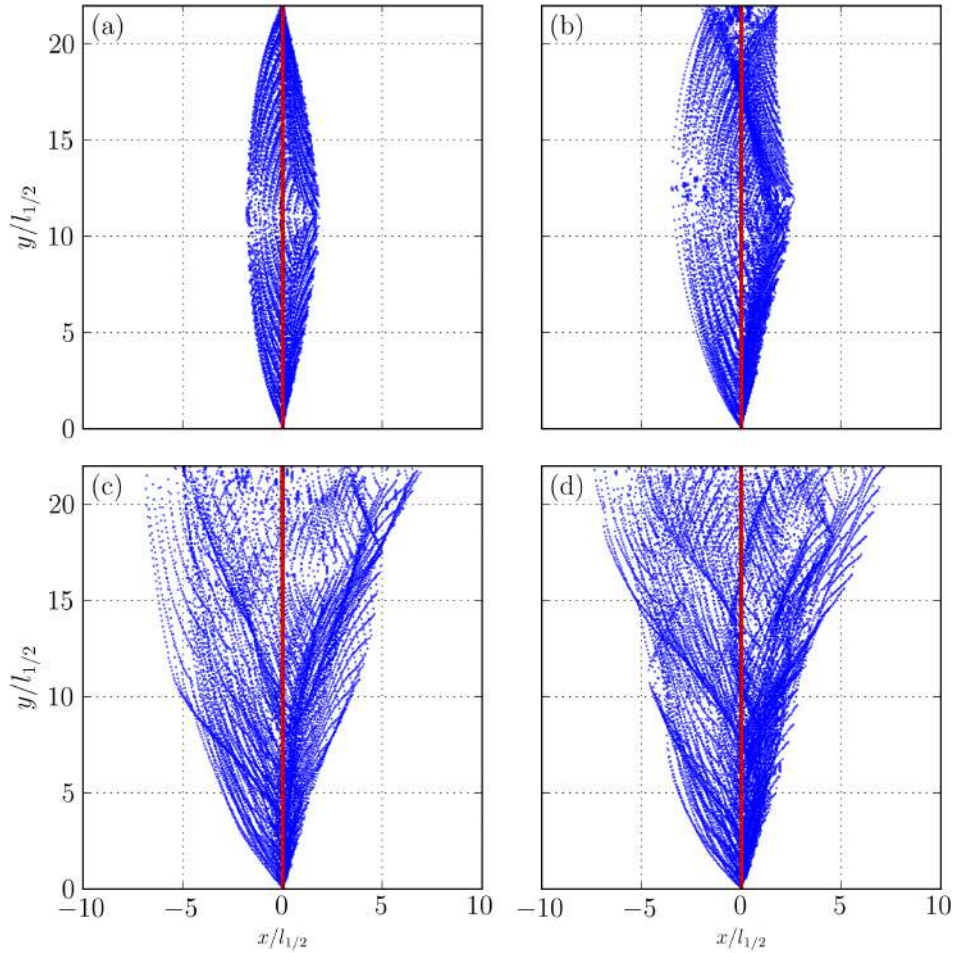


FIGURE 6.16 – Position instantanée (bleu) et moyenne (rouge) du front de détonation bidimensionnel pour les différentes valeurs d'énergie d'activation réduite, pour une simulation 2-D. (a) : $E_a/R_u T_0 = 20$, (b) : $E_a/R_u T_0 = 30$, (c) : $E_a/R_u T_0 = 38.23$ et (d) : $E_a/R_u T_0 = 48$.

6.4.1 Profils du front de choc

La Figure 6.16 montre une superposition de 100 positions instantanées que prend un front de détonation bidimensionnel lors de sa propagation. Une moyenne sur 100 000 positions est montrée en couleur rouge. Une translation horizontale est appliquée de façon à centrer les différents profils au point $(x = 0, y = 0)$. Les oscillations du front semble montrer deux tendances. Pour les énergies d'activation qui décrivent des mélanges stables ($E_a/R_u T_0 = 20$), les oscillations sont centrées autour de la position moyenne et au centre du canal. Cela montre que le front de détonation connaît un mode de propagation régulier avec un couplage acoustique avec le canal. En revanche, pour les cas des énergies d'activation réduite qui décrivent des mélanges instables un comportement chaotique avec des amplitudes de la position instantanée pouvant atteindre $5 l_{1/2}$.

6.4.2 Moyennes de variables thermodynamiques et cinétiques

L'évolution des variables thermodynamiques derrière le choc précurseur est comparée entre les configurations 2-D et 3-D. La Figure 6.17 montre l'évolution de la pression moyenne \bar{p} normalisée par la pression initiale des gaz frais p_0 . Malgré les différences observées sur les structures instantanées, les pressions moyennes obtenues sont similaires entre les deux configurations. Les valeurs à l'état vN coïncident pour les quatre mélanges. Le gradient de pression diminue avec l'augmentation de l'énergie d'activation. Les profils

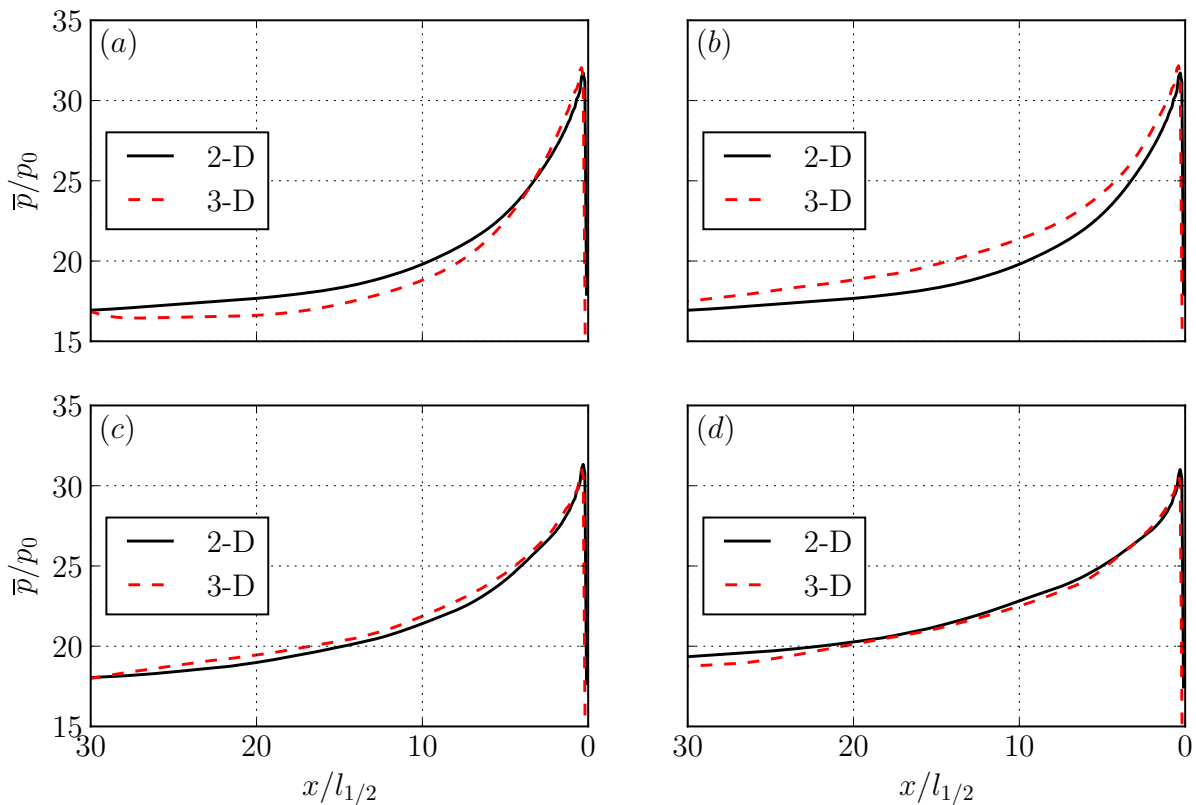


FIGURE 6.17 – Évolution des profils moyens de pression \bar{p} normalisée par p_0 en aval du front de détonation. (a) $E_a/R_uT_0 = 20$, (b) $E_a/R_uT_0 = 30$, (c) $E_a/R_uT_0 = 38.23$ et (d) $E_a/R_uT_0 = 48$.

de température moyenne normalisé par la température initiale des gaz frais \tilde{T}/T_0 sont présentés dans la Figure 6.18. Les profils ne diffèrent pas qu'il s'agisse des configurations 2-D ou 3-D. Ces résultats montrent que malgré les différences importantes dans les champs instantanés qui sont constatées entre les simulations 2-D et 3-D, la structure moyenne reste similaire. L'épaisseur hydrodynamique h_t est définie comme la distance entre le choc précurseur et le plan sonique. Les différents profils du nombre de Mach moyen sont présentés sur la Figure 6.19. Il est défini par $\tilde{M} = (\tilde{u} - D_{CJ})/\tilde{c}$, avec $\tilde{c} = \sqrt{\gamma\bar{p}/\bar{\rho}}$ la vitesse du son. L'écoulement en aval du choc est subsonique et accélère jusqu'à l'état sonique. Les épaisseurs hydrodynamiques pour chaque configuration et chaque énergie d'activation

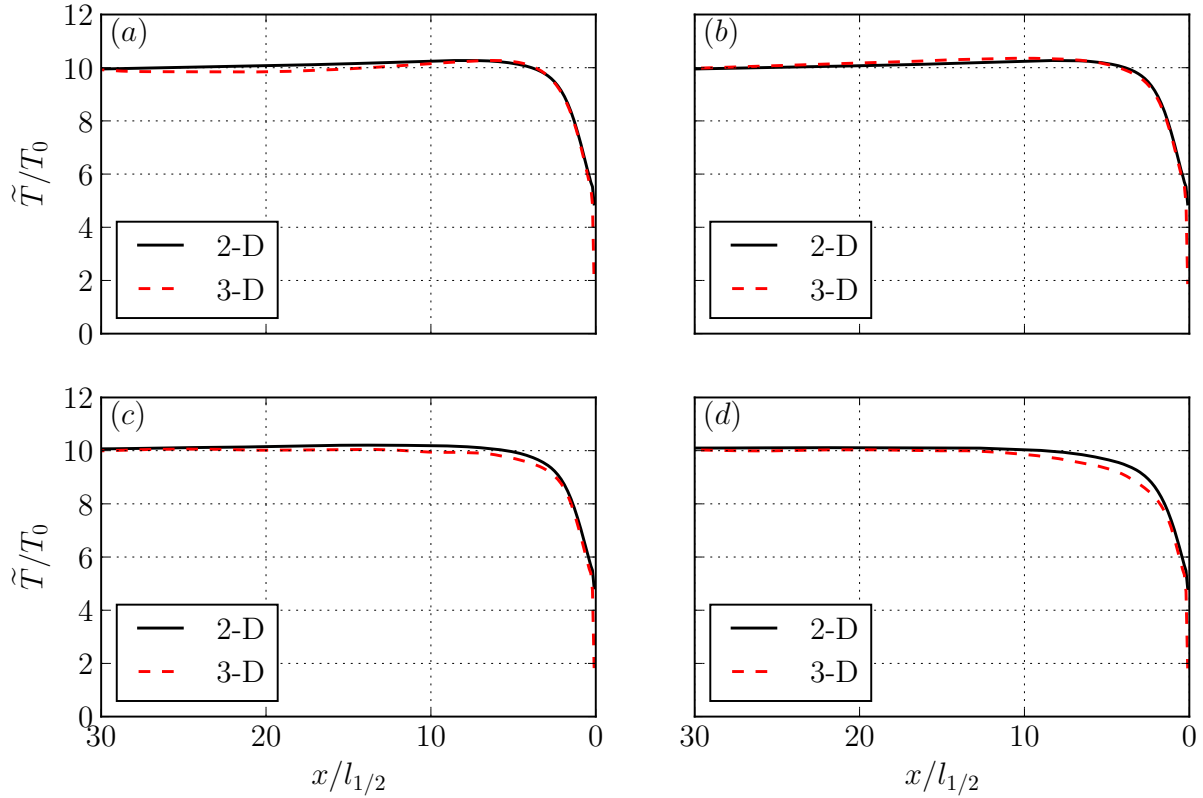


FIGURE 6.18 – Évolution des profils moyens de la température \tilde{T} normalisée par T_0 en aval du front de détonation. (a) $E_a/R_uT_0 = 20$, (b) $E_a/R_uT_0 = 30$, (c) $E_a/R_uT_0 = 38.23$ et (d) $E_a/R_uT_0 = 48$.

sont regroupées dans la Tableau 6.4. La sensibilité du mélange affecte l'épaisseur hydrodynamique avec une augmentation progressive de $25 l_{1/2}$ pour une énergie d'activation réduite $E_a/R_uT_0 = 20$ jusqu'à $100 l_{1/2}$ pour $E_a/R_uT_0 = 48$.

On constate que $h_t/(l_{1/2} \times E_a/R_uT_0)$ augmente légèrement avec E_a/R_uT_0 . La dépendance est moindre dans le cas 3-D $h_t/(l_{1/2} \times E_a/R_uT_0) \sim (E_a/R_uT_0)^{0.46}$ par rapport au cas 2-D $h_t/(l_{1/2} \times E_a/R_uT_0) \sim (E_a/R_uT_0)^{0.7}$. Une seconde échelle caractéristique de la

TABLE 6.4 – Épaisseur hydrodynamique h_t

E_a/R_uT_0	2-D	3-D
20	$25 l_{1/2}$	$20 l_{1/2}$
30	$30 l_{1/2}$	$30 l_{1/2}$
38.23	$60 l_{1/2}$	$50 l_{1/2}$
48	$100 l_{1/2}$	$70 l_{1/2}$

détonation est relative à la zone de réaction. La Figure 6.20 illustre l'évolution de la moyenne de la fraction massique de gaz frais. Pour les mélanges stables, 90% de gaz frais est consommée à une distance de $5 l_{1/2}$. Cependant, le reste est consommé à une distance

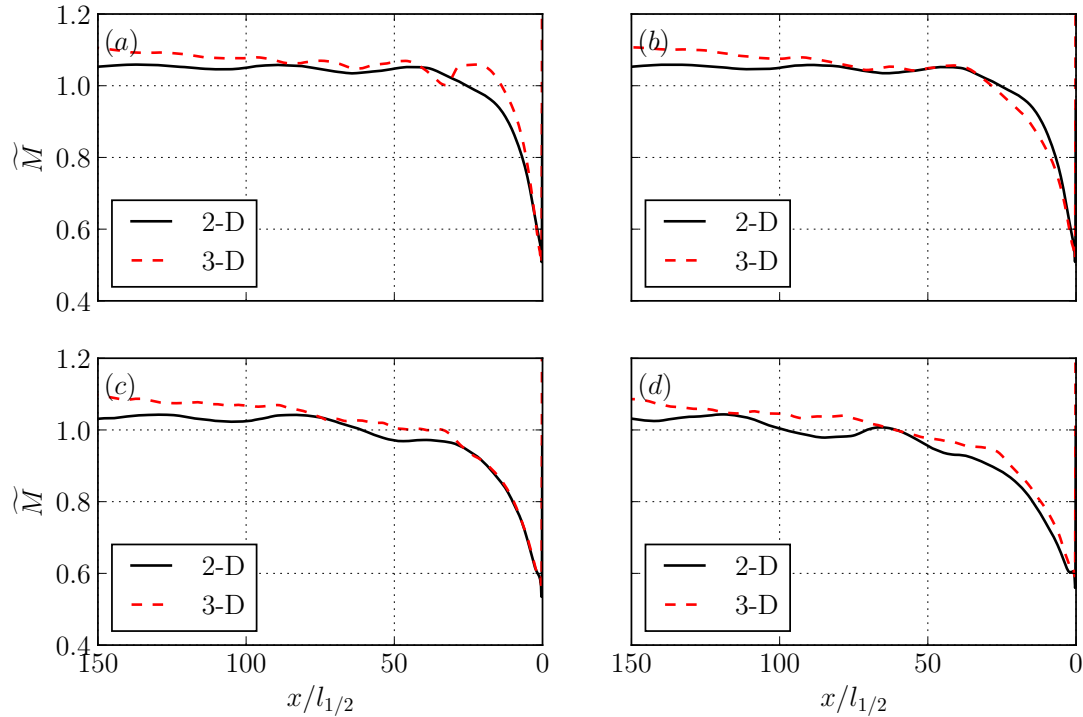


FIGURE 6.19 – Évolution des profils moyens du nombre de Mach \widetilde{M} en aval du front de détonation. (a) $E_a/R_u T_0 = 20$, (b) $E_a/R_u T_0 = 30$, (c) $E_a/R_u T_0 = 38.23$ et (d) $E_a/R_u T_0 = 48$.

de $40 l_{1/2}$ du choc précurseur. Pour un mélange à $E_a/R_u T_0 = 20$, la courbes 3-D se séparent de la courbe 2-D en dessous de 0.1 pour une fin de réaction atteinte à $20 l_{1/2}$. Cet effet, montre la difficulté d’approcher statistiquement la zone de réaction. Pour les mélanges instables, 90% de gaz frais est consommée à une distance approximative de $10 l_{1/2}$. La fin de la zone de réaction est situé vers $60 l_{1/2}$. Le dégagement de chaleur associé a chaque mélange est étudié à travers l’évolution spatiale du taux de dégagement de chaleur moyen $\widetilde{\omega}$ de la Figure 6.21 dans le cas 3-D. L’épaisseur relative au dégagement de chaleur est située entre 0 et $4 l_{1/2}$. L’augmentation de l’énergie d’activation se traduit par un pic de $\widetilde{\omega}$ prématuré. Avec l’augmentation de $E_a/R_u T_0$, l’amplitude de $\widetilde{\omega}$ décroît également plus vite, puis le taux de dégagement de chaleur devient plus important au-delà de $5 l_{1/2}$, traduisant certainement la présence des poches de gaz imbrûlés. On peut également constater que les profils du taux de dégagement de chaleur sont les mêmes pour tous les mélanges sur la demi-longueur de réaction $l_{1/2}$.

On peut également constater, comme suggéré par le paramètre χ , que les profils du taux de dégagement de chaleur semblent s’adimensionnaliser sur une distance de 5 à $15 l_{1/2}/(E_a/R_u T_0)^\alpha$ comme l’atteste la Figure 6.21b, avec la meilleure valeur de α étant de 0.46.

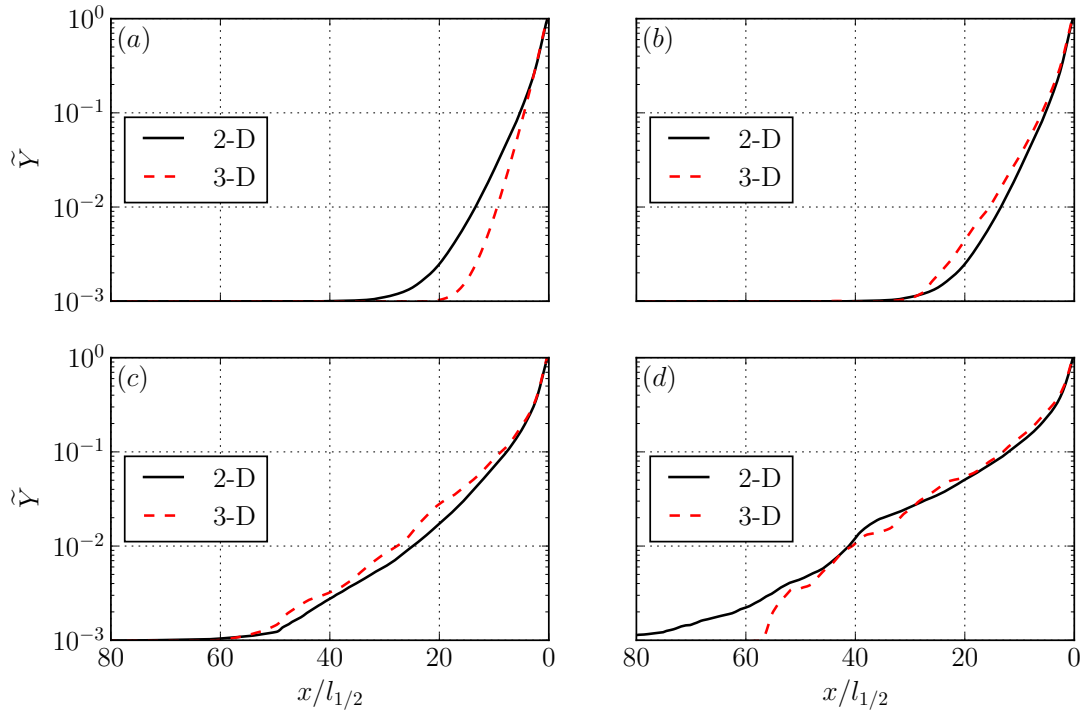


FIGURE 6.20 – Évolution des profils moyens de la fraction massique de gaz frais \tilde{Y} en aval du front de détonation. (a) $E_a/R_u T_0 = 20$, (b) $E_a/R_u T_0 = 30$, (c) $E_a/R_u T_0 = 38.23$ et (d) $E_a/R_u T_0 = 48$.

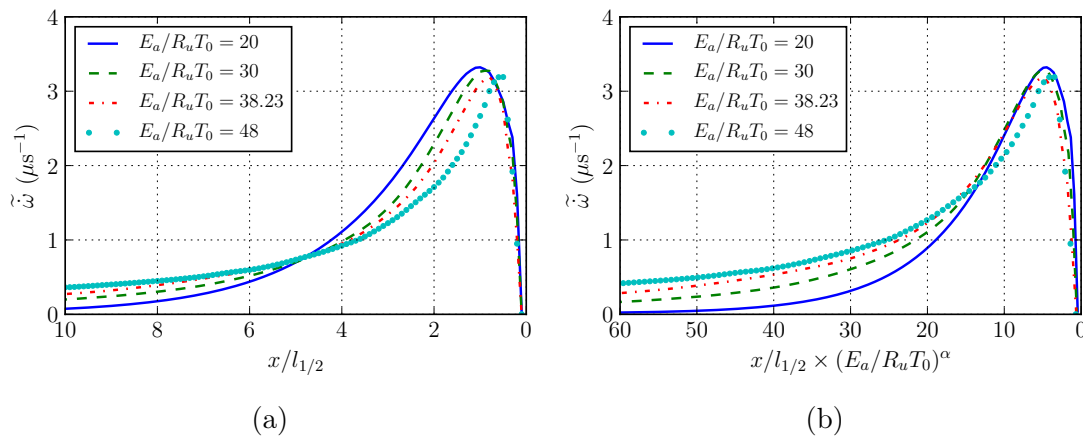


FIGURE 6.21 – Taux de production moyen d'énergie chimique $\tilde{\omega}$ pour les différents mélange. (a) La distance normalisée par la demi-longueur de réaction $l_{1/2}$, (b) la distance est normalisée par le rapport demi-longueur de réaction $l_{1/2}$ sur l'énergie d'activation réduite $(E_a/R_u T_0)^\alpha$, avec $\alpha = 0.46$.

Les profils des variables thermodynamiques en fonction de la fraction massique moyenne de gaz frais nous renseignent sur la trajectoire suivie par les particules dans l'espace des phases (voir Figure 6.22). Les profils de masse volumique sont indépendants de l'énergie d'activation. Un léger décrochage est constaté sur les profils de pression et de température. Cette dispersion pourrait provenir des fluctuations importantes des variables thermodynamiques.

Les profils de la masse volumique et de la pression sont décroissants avec le dégagement de chaleur. La température augmente également avec le dégagement de chaleur puis décroît à partir de $\tilde{Y} = 10^{-1}$. En effet, pour un nombre de Mach $\tilde{M} \in (1/\sqrt{\gamma}, 1)$, les effets de détentes prennent le pas sur les effets d'expansion volumétrique. L'épaisseur

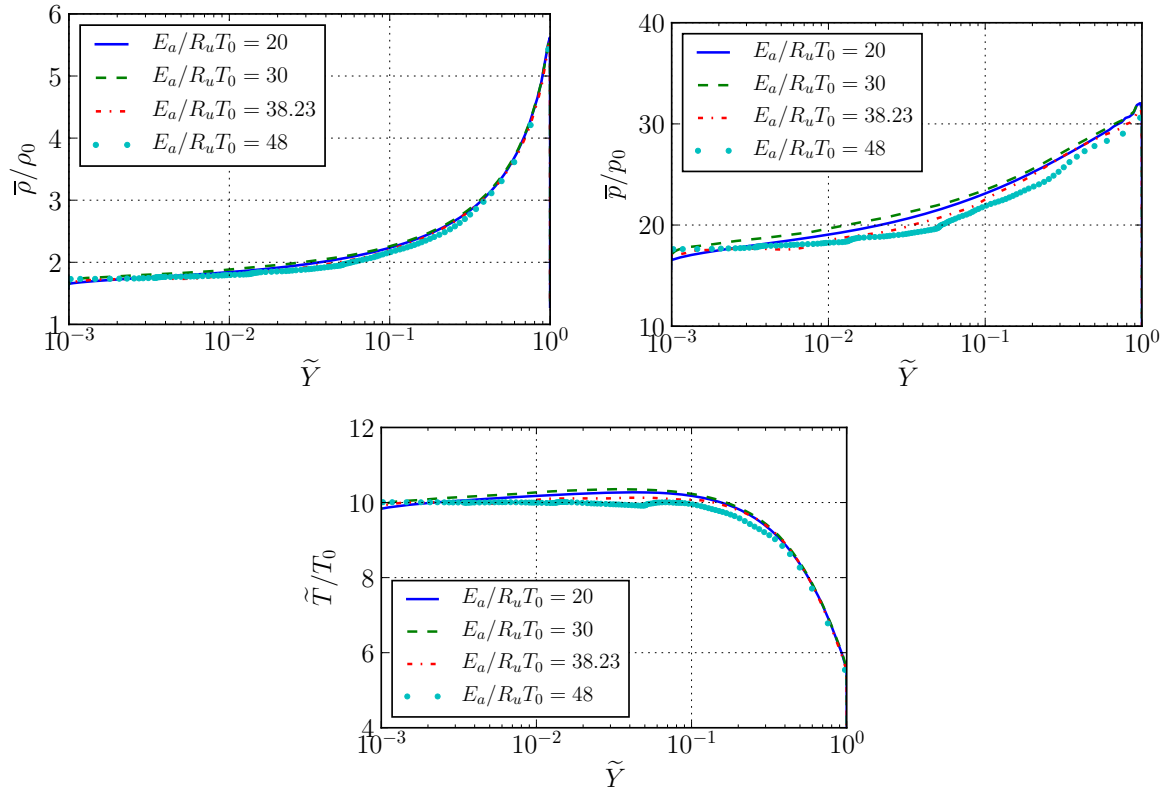


FIGURE 6.22 – Profils moyens des variables thermodynamiques obtenus en fonction de la fraction massique des gaz frais pour les différentes énergies d'activation.

hydrodynamique est la distance qui sépare la position moyenne du choc du plan sonique. Tous les événements susceptibles d'affecter la propagation du front de détonation sont contenus dans cette zone. La Figure 6.23 présente une comparaison de l'évolution des variables thermodynamiques et de la fraction massique en fonction de la distance au choc normalisée par la demi-zone de réaction $l_{1/2}$ et l'épaisseur hydrodynamique h_t . Quel que soit l'énergie d'activation réduite, les évolutions de masse volumique, de température et de fraction massique se confondent pour $(x/l_{1/2} < 1)$. Puis elles divergent au-delà de cette longueur. Cependant, les différences entre les profils sont largement amoindris quand la distance est adimensionnalisée par l'épaisseur hydrodynamique pour $x/h_t \in (0.4, 1)$, notamment pour la masse volumique et la fraction massique. Pour ces distances, la fraction massique est inférieure à 5.10^{-2} .

Ainsi, les résultats nous indiquent que le taux de dégagement de chaleur est autosimilaire sur $l_{1/2}$, pendant lequel la fraction massique chute à $1/2$; puis semble également

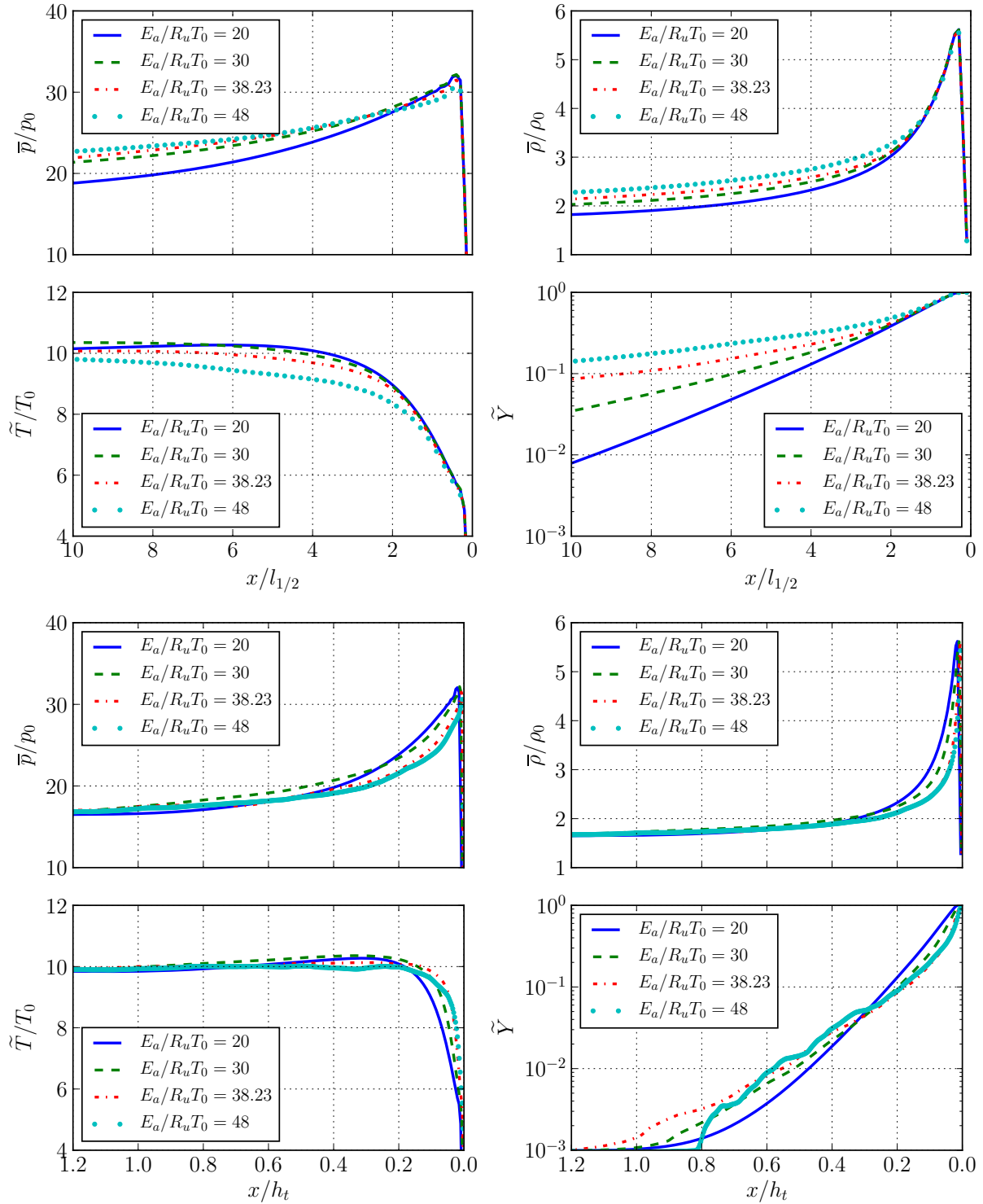


FIGURE 6.23 – Profils moyens des variables thermodynamiques et de la fraction massique des gaz frais obtenus pour différents normalisation spatiales. (Haut) normalisation de la distance par la demi-longueur de réaction, (bas) : distance normalisée par l'épaisseur hydrodynamique.

être autosimilaire entre 5 et 15 $l_{1/2}/(E_a/R_u T_0)^\alpha$ avec $\alpha = 0.46$ durant lequel \tilde{Y} chute à 0.1. On a un comportement autosimilaire pour une distance inférieure à $l_{1/2}$ pour la masse volumique, la température et la fraction massique. Lorsque le nombre de Mach

s'approche de 1, en dépassant $1/\sqrt{\gamma}$, l'épaisseur hydrodynamique est une bonne candidate pour adimensionnaliser les résultats ($x/h_t \simeq 0.4 - 1$ et $\tilde{Y} < 5 \cdot 10^{-2}$) notamment pour la masse volumique et la fraction massique. L'épaisseur hydrodynamique apparaît ainsi comme une échelle externe ("outer scale").

6.4.3 Fluctuations thermodynamiques

L'écoulement engendré derrière le front de détonation se distingue par des fluctuations importantes des grandeurs thermodynamiques. Les effets compressibles sont mis en évidence sur la Figure 6.24. Les champs bidimensionnels des fluctuations de masse volumique normalisées par la moyenne sont présentés dans le repère lié à la position moyenne du front de détonation. Pour un mélange stable d'énergie d'activation $E_a/R_u T_0 = 20$, le maximum des fluctuations est atteint derrière le choc précurseur, au centre et aux parois du canal. Les collisions des points triples sont à la source de ces observations. Puisque la probabilité que deux points triples se rencontrent ailleurs qu'au centre est faible, l'amplitude des fluctuations dans les autres régions du front du centre et des parois est inférieure. Les fluctuations maximales atteintes par la masse volumique pour ce mélange sont de 30% de la valeur moyenne. Les champs obtenus pour les autres mélanges montrent des fluctuations plus importantes allant jusqu'à 60% de la valeur moyenne. Les fluctuations deviennent équiréparties sur tout le front, avec toutefois des valeurs maximales atteintes près des parois. En effet, la probabilité que les points triples entrent en collision en-dehors du centre du canal devient plus élevée à mesure que la sensibilité à la température du mélange est augmentée. En outre, les fluctuations s'étalent sur des distances plus importantes en aval du front. Cela s'explique par la présence de poches de gaz imbrûlées derrière le front. De plus, l'interaction des ondes transverses avec ces poches déclenche des instabilités qui accentuent les fluctuations de masse volumique. Dans la suite de la présentation, les fluctuations seront moyennées selon la direction (y) pour le cas 2-D et sur le plan (y, z) pour le cas 3-D.

Un autre critère qui permet d'observer la compressibilité d'un écoulement est le nombre de Mach turbulent $\tilde{M}_t = \sqrt{(\tilde{u}''^2 + \tilde{v}''^2 + \tilde{w}''^2)}/\tilde{c}$ où $\tilde{w}''^2 = 0$ en 2-D. Les résultats bidimensionnels sont similaires à ceux obtenus par les simulations tridimensionnelles. D'une manière générale, les valeurs à l'état CJ sont similaires entre les différents mélanges, se stabilisant ainsi vers $\tilde{M}_t \sim 0.15$ après la zone de réaction. À l'état vN, l'amplitude de \tilde{M}_t croît avec la sensibilité du mélange. Elle varie ainsi de 0.5 pour un mélange à $E_a/R_u T_0 = 20$ jusqu'à 0.6 pour un mélange à $E_a/R_u T_0 = 48$. D'une manière générale, une chute de 75% est constatée entre les états vN et CJ. Les fluctuations moyennes de pression $\tau_p = \sqrt{\overline{p'^2}}/\bar{p}$,

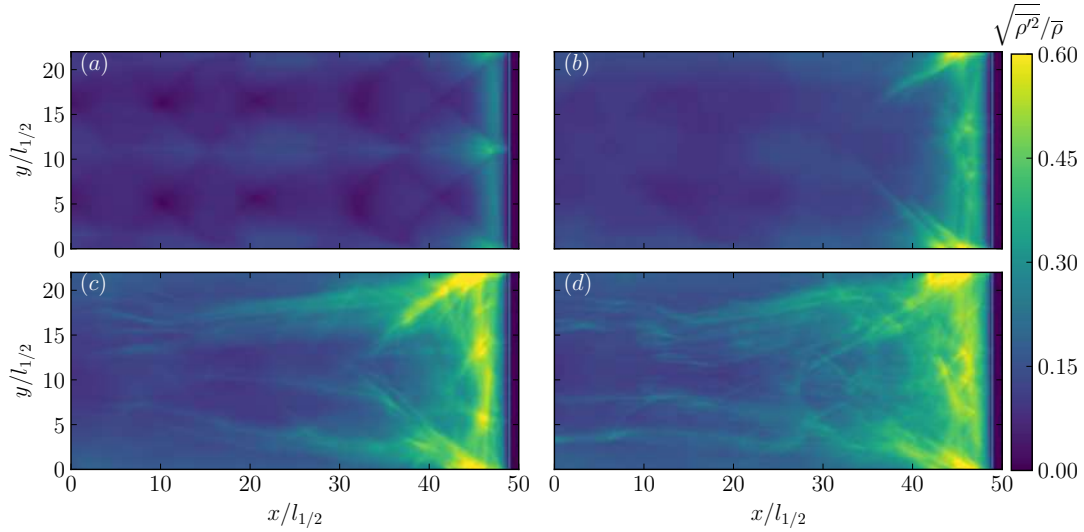


FIGURE 6.24 – Champs de fluctuations de masse volumique normalisées par la masse volumique moyenne, présenté dans le repère moyen du choc. (a) $E_a/R_u T_0 = 20$, (b) $E_a/R_u T_0 = 30$, (c) $E_a/R_u T_0 = 38.23$ et (d) $E_a/R_u T_0 = 48$.

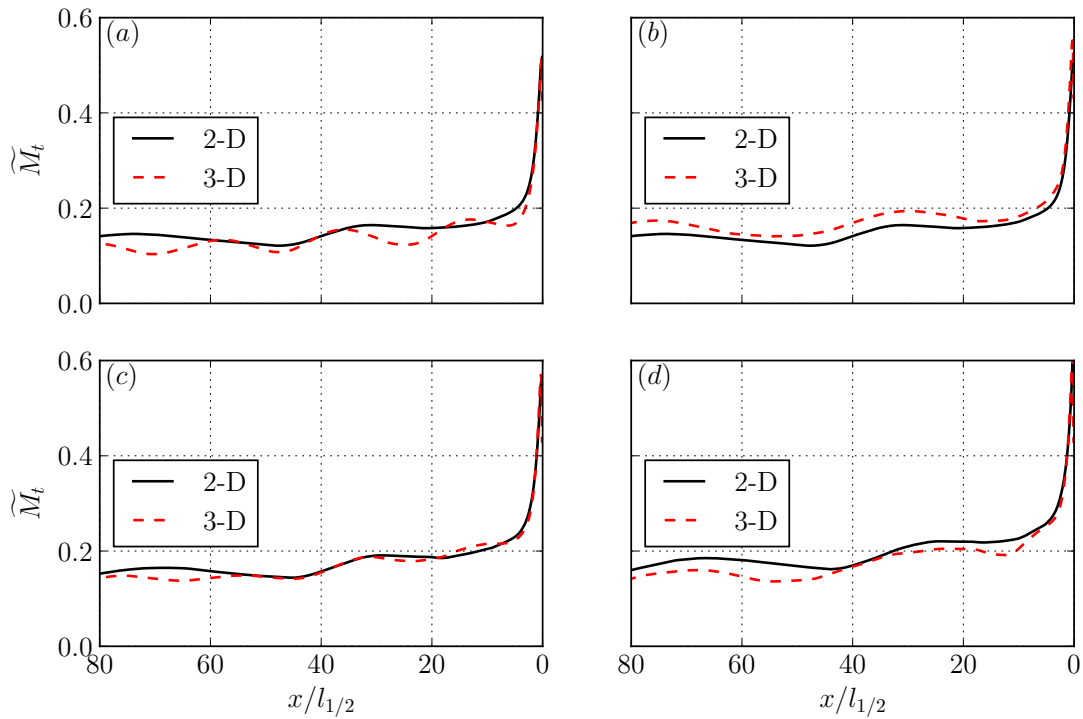


FIGURE 6.25 – Évolution du nombre de Mach turbulent en fonction de la distance pour différentes énergies d'activation pour les cas 2-D et 3-D. (a) $E_a/R_u T_0 = 20$, (b) $E_a/R_u T_0 = 30$, (c) $E_a/R_u T_0 = 38.23$ et (d) $E_a/R_u T_0 = 48$.

de masse volumique $\tau_\rho = \sqrt{\rho'^2/\bar{\rho}}$ et de température $\tau_T = \sqrt{T'^2/\bar{T}}$ sont quantifiées (voir la Figure 6.26) pour les simulations 3-D. Pour les trois quantités et tous les mélanges, le maximum est atteint à une distance proche du choc incident ($\sim 5 l_{1/2}$). La sensibilité du mélange influe sur les amplitudes et la distance de relaxation. En effet, elle est de $10 l_{1/2}$

pour un mélange stable $E_a/R_uT_0 = 20$ et peut aller jusqu'à $40 l_{1/2}$ pour un mélange instable $E_a/R_uT_0 = 48$. Les fluctuations de masse volumique sont les plus importantes, de 10% à 25% de la valeur moyenne. La distance à mi-hauteur des fluctuations des températures est plus étroite que les autres fluctuations. La décroissance des fluctuations pour cette quantité est la plus rapide. Les maxima atteints sont de 7% pour un mélange stable $E_a/R_uT_0 = 20$ jusqu'à 22% pour un mélange instable $E_a/R_uT_0 = 48$. Les fluctuations de pression ont des amplitudes inférieures à celles des autres variables au sein de la zone de réaction (i.e. pour \tilde{Y} au-dessus de $\geq 5 \cdot 10^{-1}$). Au-delà, elles deviennent plus importantes. Le maximum des fluctuations semble être seulement légèrement affecté par la sensibilité du mélange avec, toutefois une variation allant de 6% jusqu'à 9% pour respectivement, un mélange stable et instable. Au-delà de la zone de réaction, les fluctuations sont inférieures à 2%. Ainsi, au point CJ, pour ces conditions initiales ($p_0 = 0.1\text{MPa}$, $T_0 = 295\text{K}$) et pour $p_{\text{CJ}} \simeq 1.75\text{MPa}$, on peut obtenir un niveau acoustique de $20 \log_{10} \left(\overline{p'^2}^{1/2} / 20 \mu\text{Pa} \right) \simeq 185\text{dB}$.

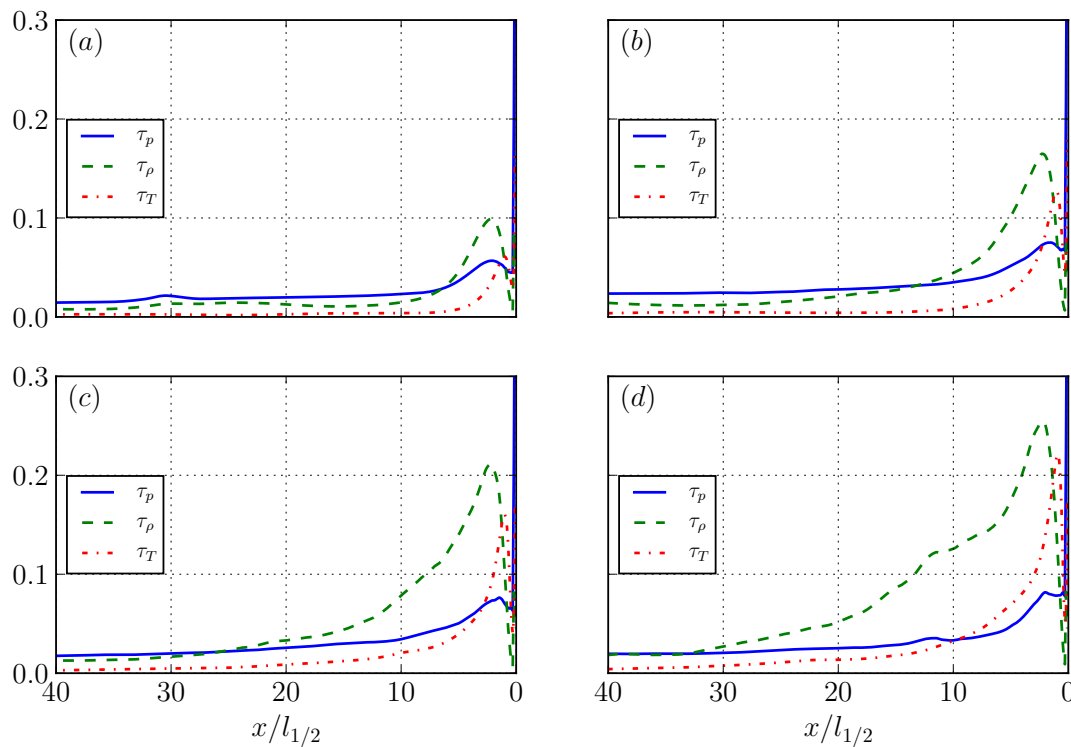


FIGURE 6.26 – Évolution des fluctuations thermodynamiques normalisés en fonction de la distance pour différentes énergies d'activation pour le cas 3-D. (a) $E_a/R_uT_0 = 20$, (b) $E_a/R_uT_0 = 30$, (c) $E_a/R_uT_0 = 38.23$ et (d) $E_a/R_uT_0 = 48$.

En supposant que les moyennes quadratiques des fluctuations thermodynamiques soient

liées par des évolutions polytropiques [279, 280], on peut définir les relations suivantes :

$$\frac{\sqrt{p'^2}}{\bar{p}} = n_{p\rho} \frac{\sqrt{\rho'^2}}{\bar{\rho}} \quad (6.7)$$

$$\frac{\sqrt{\rho'^2}}{\bar{\rho}} = \frac{1}{n_{\rho T} - 1} \frac{\sqrt{\widetilde{T}''^2}}{\widetilde{T}} \quad (6.8)$$

avec $n_{p\rho}$ et $n_{\rho T}$ les coefficients polytropiques. $n_{p\rho} = 0$ signifie un comportement isobare, $n_{\rho T} = 1$ un comportement isotherme et $n_{p\rho} = n_{\rho T} = \gamma$ un comportement isentropique. On peut définir un terme reliant les fluctuations de température à celles de la masse volumique [280]

$$\Gamma_B = \frac{\frac{\sqrt{p'^2}}{\bar{p}} - \frac{\sqrt{\widetilde{T}''^2}}{\widetilde{T}}}{\frac{\sqrt{\rho'^2}}{\bar{\rho}}} \quad (6.9)$$

Lorsque les fluctuations sont isobares, isentropiques ou isothermes, le coefficient Γ_B prend respectivement les valeurs 0, $2-\gamma$ et 1. En comparant Γ_B à sa valeur dans le cas isentropique Γ_B^{isen} , Cela suggère que ce critère quantitatif permet de comparer l'importance relative des fluctuations acoustiques par rapport aux autres fluctuations. Les trois coefficients précédents sont regroupés sur la Figure 6.27 pour les différentes énergies d'activation en 3-D. Les coefficients $n_{p\rho}$ et $n_{\rho T}$ subissent une augmentation derrière le choc à l'état vN puis diminuent rapidement. L'équilibre entre les fluctuations de température et la masse volumique s'opère rapidement derrière le choc en atteignant une valeur comprise dans l'intervalle $1.01\gamma < n_{\rho T} < 1.12\gamma$ pour les quatre énergies d'activation. En revanche, le coefficient $n_{p\rho}$ diminue jusqu'à $0.57 < n_{p\rho} < 0.75$ puis, connaît une croissance jusqu'à atteindre un intervalle $0.84\gamma < n_{p\rho} < 0.96\gamma$. Jamme et al. [281, 282] ont trouvé dans le cas inerte avec $\gamma = 1.4$ des valeurs post-choc comparables de $n_{p\rho} \simeq 0.7$. Cependant, leur valeur de $n_{\rho T}$ est de 1.9, valeur moins élevée que nos valeurs post-choc. Donzis et Jagannathan [283] ont cependant trouvé des valeurs de $n_{p\rho} \simeq 1.2$ dans une configuration de turbulence compressible forcée. Cette valeur est compatible avec celle trouvée dans cette étude loin du choc. D'une façon similaire, le coefficient Γ_B diminue jusqu'à atteindre des valeurs négatives suivie d'une augmentation progressive convergeant ainsi vers $0.8 < \Gamma_B < 0.9$ selon le mélange considéré. Ainsi, les valeurs de Γ_B nous indique que le comportement des fluctuations se situe entre un comportement isentropique et isotherme. Les différents coefficients de corrélation entre les fluctuations des variables thermodynamiques $R_{p'\rho'} = \overline{p'\rho'}/\sqrt{\overline{p'^2}\overline{\rho'^2}}$, $R_{T''p'} = \overline{T''p'}/\sqrt{\overline{T''^2}\overline{p'^2}}$ et $R_{T''\rho'} = \overline{T''\rho'}/\sqrt{\overline{T''^2}\overline{\rho'^2}}$ sont présentés sur la Figure 6.28. Le coefficient de corrélation est compris entre -1 et 1 (inégalité de Cauchy-Schwartz). Il tend vers 1 ou -1, selon que les termes soient respectivement corrélés ou anti-corrélés. Il vaut 0 s'ils ne sont pas corrélés.

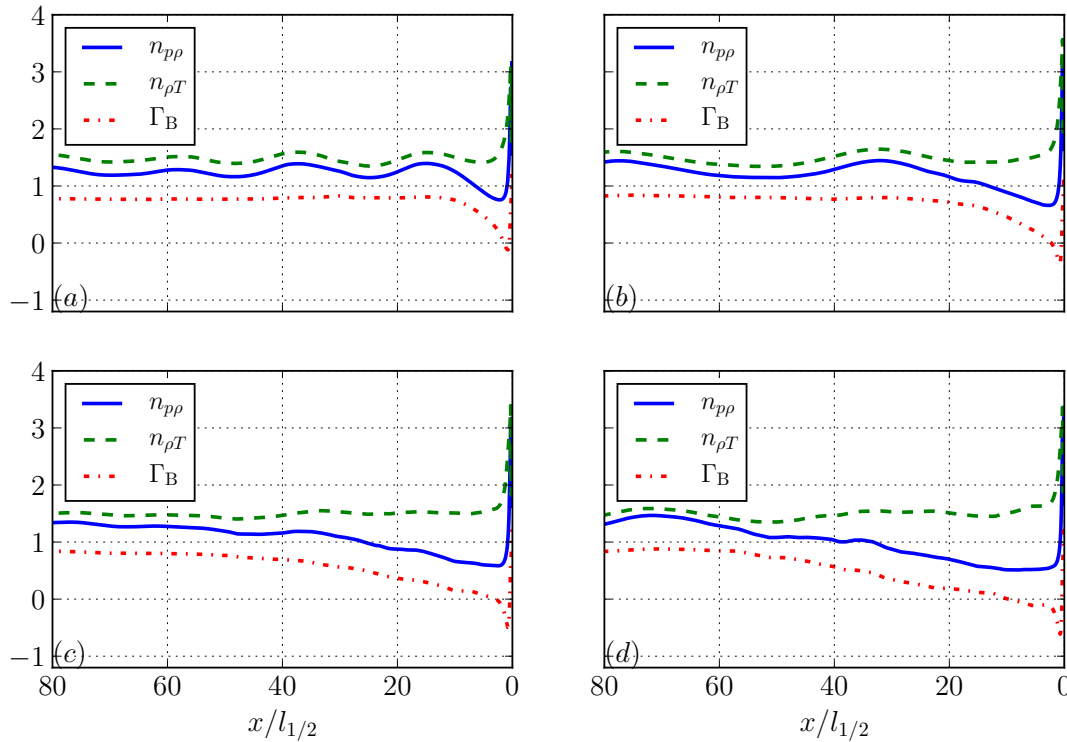


FIGURE 6.27 – Évolution des coefficients polytropiques reliant les moyennes des fluctuations thermodynamiques normalisées en fonction de la distance derrière le choc pour les quatre énergies d’activation pour le cas 3-D. (a) $E_a/R_u T_0 = 20$, (b) $E_a/R_u T_0 = 30$, (c) $E_a/R_u T_0 = 38.23$ et (d) $E_a/R_u T_0 = 48$.

Les fluctuations de température sont en très bonne correspondance avec les fluctuations de fraction massique, comme le montre la Figure 6.29, nous indiquant que les fluctuations de température sont principalement liées au dégagement de chaleur. On constate néanmoins que la relation est affine très proche du choc et qu’un autre mécanisme de production des fluctuations de température est présent, comme par exemple, les instabilités post-choc.

Proches du choc, les fluctuations de pression sont faiblement corrélées aux fluctuations de masse volumique et décorrélées des fluctuations de température. Or $R_{T''\rho'} = -0.75$, ce qui indique que $\bar{\rho}'$ et \widetilde{T}'' sont anti-corrélées. Cela pourrait signifier que dans la zone du front de dégagement de chaleur, les fluctuations obéissent à un comportement quasi-isobare (le nombre de Mach post-choc étant relativement faible).

Les facteurs de corrélation vont ensuite relaxer vers d’autres valeurs constantes au plan sonique. La distance de relaxation est d’autant plus grande que l’énergie d’activation réduite augmente.

Proche du plan sonique, $R_{p'\rho'}$ tend vers un, \bar{p}' et $\bar{\rho}'$ sont corrélées. \widetilde{T}'' et $\bar{\rho}'$ sont faiblement corrélées et \widetilde{T}'' et \bar{p}' sont légèrement corrélées ($R_{T''p'}$ oscillant entre 0.5 et 0.75). La température CJ est deux à trois fois plus grande que la température vN, ce qui

induit des variations de température d'induction chimique d'un ordre de grandeur. Ainsi, il est possible que le dépôt d'énergie supplémentaire qui s'ensuivrait d'une augmentation locale de la température se ferait selon un processus préférentiel de combustion à volume constant et que cela engendre des micro-blasts et les ondes de pressions associées. On parlera ainsi de comportement quasi-isentropique des fluctuations par la suite.

Ce comportement asymptotique de "turbulence acoustique" a également été observé par Cai et al. [284] dans le cas d'une turbulence compressible décroissante avec des fluctuations de température initiales importantes et initialement anti-corrélées avec celles de la masse volumique. Dans cette dernière configuration, ρ' et T' devenaient également décorrélées. Une étude paramétrique a également montré que les fluctuations oscillaient entre un comportement isotherme et isentropique, selon la valeur de M_t et du niveau relatif des fluctuations de la partie solénoïdal du champ de vitesses. Ce résultat concorde avec les valeurs asymptotiques de Γ_B trouvées dans sur la Figure 6.27.

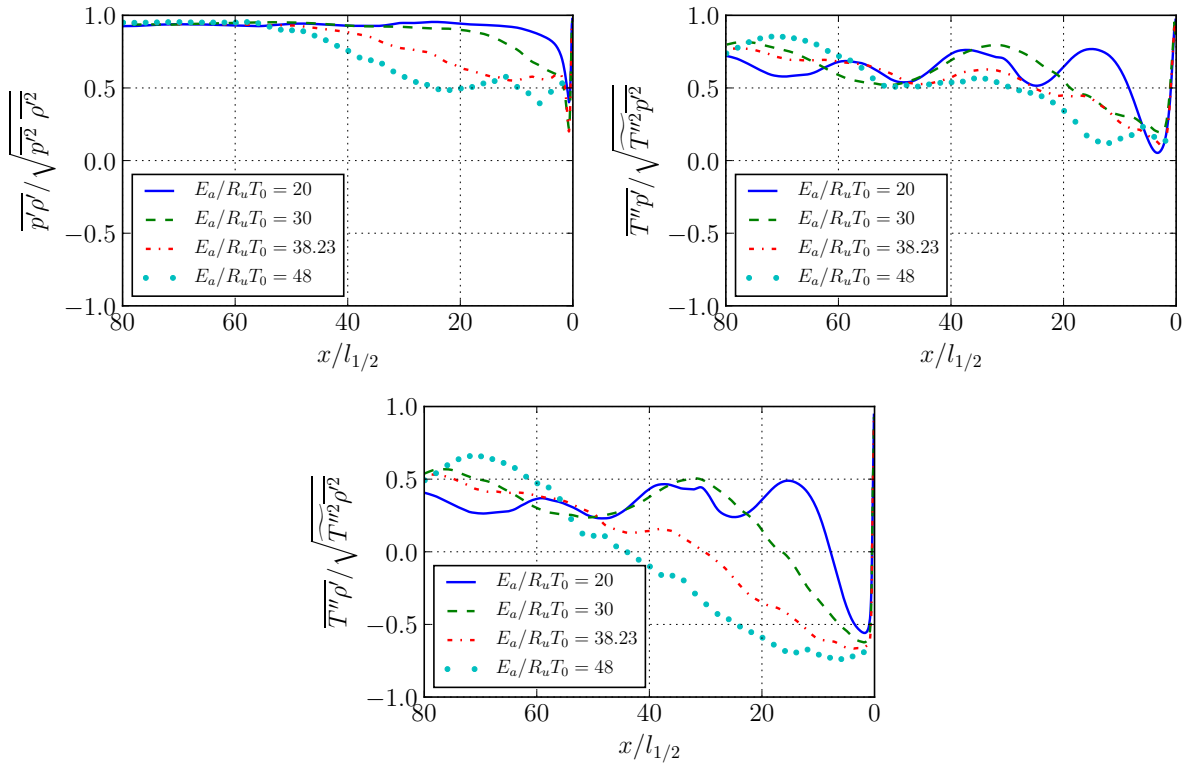


FIGURE 6.28 – Évolution des coefficients de corrélation entre des variables de fluctuations thermodynamiques pour les différents mélanges dans la configuration 3-D. (a) : $\overline{p'\rho'}/\sqrt{\overline{p'^2}\overline{\rho'^2}}$, (b) : $\overline{T''p'}/\sqrt{\overline{T''^2}\overline{p'^2}}$, (c) : $\overline{T''\rho'}/\sqrt{\overline{T''^2}\overline{\rho'^2}}$.

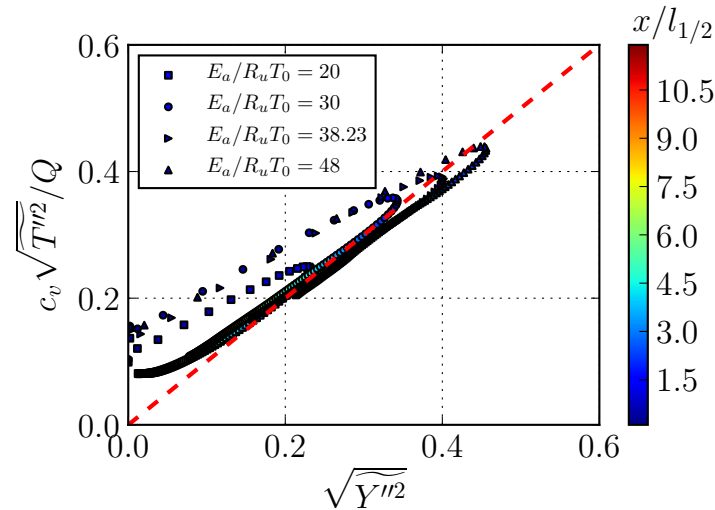


FIGURE 6.29 – Fluctuations de température normalisées en fonction de fluctuations de fraction massique pour les différentes énergies d’activation.

6.4.4 Fluctuations des vitesses

La Figure 6.31 montre l’évolution longitudinale des composantes diagonales du tenseur de Reynolds normalisées par D_{CJ}^2 pour les différents mélanges. Une augmentation importante des fluctuations est observable juste en aval du choc. Des oscillations sur les composantes transverses \widetilde{v}''^2 et \widetilde{w}''^2 sont présentes. Elles proviennent de la présence des ondes de choc transverses de la détonation et s’atténuent au fur et à mesure que l’on s’éloigne du choc précurseur. De manière générale, les trois composantes décroissent en fonction de la distance, jusqu’à atteindre 10% de la valeur post-choc. La composante \widetilde{u}''^2 montre un comportement non-monotone au voisinage de $2 l_{1/2}$ pour $E_a/R_u T_0 = 20$, distance qui diminue pour les $E_a/R_u T_0$ plus grandes. L’énergie cinétique des fluctuations $k = (\widetilde{u}''^2 + \widetilde{v}''^2 + \widetilde{w}''^2)/2$ est présentée sur la Figure 6.31a. D’une manière globale, une valeur initiale élevée en aval du front est constatée. La sensibilité du mélange influence l’amplitude des fluctuations. En effet les mélanges instables semblent avoir une amplitude supérieure à celle du mélange stable ($E_a/R_u T_0 = 20.0$). L’évolution de l’énergie cinétique est similaire pour les quatre mélanges. Elle est réalisée en deux phases : une première phase avec une décroissance rapide, située entre 0 et $10 l_{1/2}$ et une deuxième phase avec une décroissance moindre.

Une méthode qui permet d’étudier l’anisotropie de l’écoulement est le rapport entre deux composantes du tenseur de Reynolds $\widetilde{u}''^2/\widetilde{v}''^2$. Des oscillations récurrentes sont observées avec toutefois une diminution de leur fréquence en fonction de l’irrégularité du mélange. D’une façon générale, on obtient $\widetilde{u}''^2 < \widetilde{v}''^2 \cong \widetilde{w}''^2$. L’anisotropie du tenseur de Reynolds peut être également étudiée à travers le tenseur déviateur du tenseur des

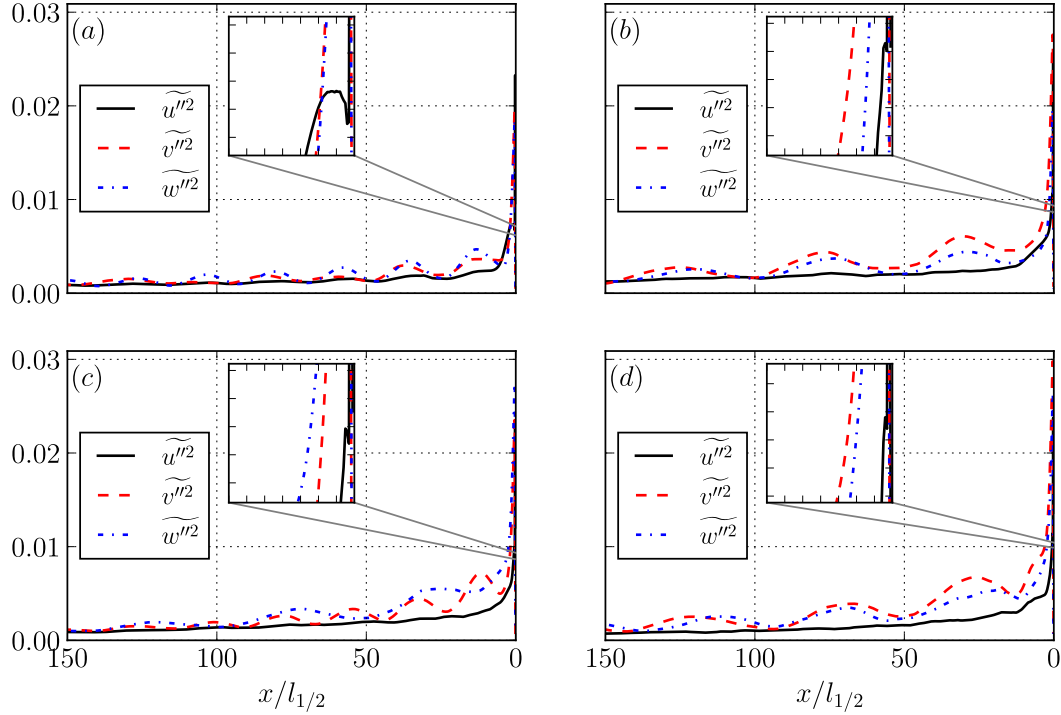


FIGURE 6.30 – Variation longitudinale des contraintes normales du tenseur de Reynolds normalisées par D_{CJ}^2 . (a) $E_a/R_u T_0 = 20$, (b) $E_a/R_u T_0 = 30$, (c) $E_a/R_u T_0 = 38.23$ et (d) $E_a/R_u T_0 = 48$.

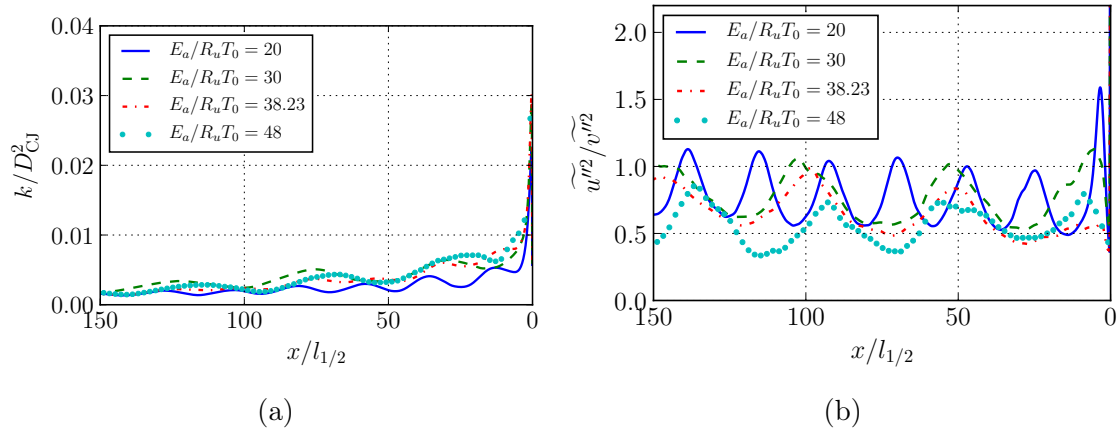


FIGURE 6.31 – Évolution longitudinale de (a) l'énergie cinétique des fluctuations et de (b) le rapport de deux composantes diagonales du tenseur de Reynolds.

contraintes de Reynolds :

$$b_{ij} = \frac{\widetilde{u_i'' u_j''}}{2k} - \frac{\delta_{ij}}{3} \quad (6.10)$$

La dynamique de l'écoulement engendrée par le front de détonation est cartographiée à l'aide des invariants de ce tenseur. En effet, puisque le premier invariant représente une trace nulle, l'évolution de ses quantités peuvent alors être étudiée à travers les invariants d'ordre 2 $II = b_{ij} b_{ji} / 2$ et d'ordre 3 $III = b_{ik} b_{kj} b_{ji} / 3$. Lumey [285] a démontré que le domaine

de variation de ces invariants est borné dans le plan (II,III). Les différents états possibles du tenseur sont alors restreints à l'intérieur du triangle de Lumley. L'origine du plan représente un état de fluctuations isotropes. Le segment (C_2, C_3) représente des fluctuations à deux composantes. Cet état est engendré par une des trois valeurs propres du tenseur d'anisotropie qui s'annule. Cette trajectoire est calculée à partir de l'équation $1-9II+27III=0$. Les segments situés entre les points (C_1, C_2) et (C_1, C_3) sont calculés respectivement à partir des équations $III=2(II/3)^{3/2}$ et $III=-2(II/3)^{3/2}$. Ces courbes présentent des régions de fluctuations axisymétriques où deux des valeurs propres sont égales. Le troisième invariant permet de distinguer différents comportements. Lorsque celui-ci est positif, la valeur propre dominante est l'axiale tandis que les deux autres sont égaux. Une structure des vecteurs propres sous forme de cigare est alors rencontrée. De la même manière, lorsque le troisième invariant est négatif, la composante radiale domine par rapport à la composante axiale menant ainsi à une structure sous forme de disque.

La Figure 6.32 montre les invariants du tenseur d'anisotropie des deux invariants (II,III). Les résultats numériques montrent que les données sont bien contenues dans le triangle de Lumley.

Les structures fluctuantes semble suivre un comportement quasi-isotrope, quelque soit la sensibilité du mélange. La Figure 6.33 illustre les corrélations des moyennes de fluctuations des vitesses pour les différents mélanges. Les fluctuations de vitesse axiale sont complètement décorréées avec les autres composantes. Ce constat est le même quelque soit la sensibilité du mélange. Les composantes $\widetilde{v''^2}$ et $\widetilde{w''^2}$ montrent de faibles corrélations pour les mélanges $E_a/R_u T_0 = 30$ et $E_a/R_u T_0 = 48$.

6.4.5 Énergie totale des fluctuations de Chu

Le concept d'énergie des fluctuations a été proposé initialement dans le contexte des écoulements incompressibles sous la forme d'énergie cinétique turbulente. En effet, Lord Reynold [286] a montré que l'amplification des petites perturbations est contenue dans le travail lié aux fluctuations de vitesse du tenseur de Reynolds. À partir de cette base, la notion d'énergie des fluctuations a été généralisée dans l'acoustique en ajoutant l'énergie acoustique qui est lié aux fluctuations de pression. Pour des applications de combustion, la présence du dégagement de chaleur influe sur les fluctuations de pression et le couplage entre les deux termes a donné naissance au critère de Rayleigh [287]. Ce critère a été extensivement utilisé dans des études d'instabilité thermoacoustiques des flammes dans les chambres à combustion [288, 289]. Il nous indique que si de la chaleur est ajoutée lors de la phase de compression de l'écoulement, et que celui-ci est enlevé lors de la phase

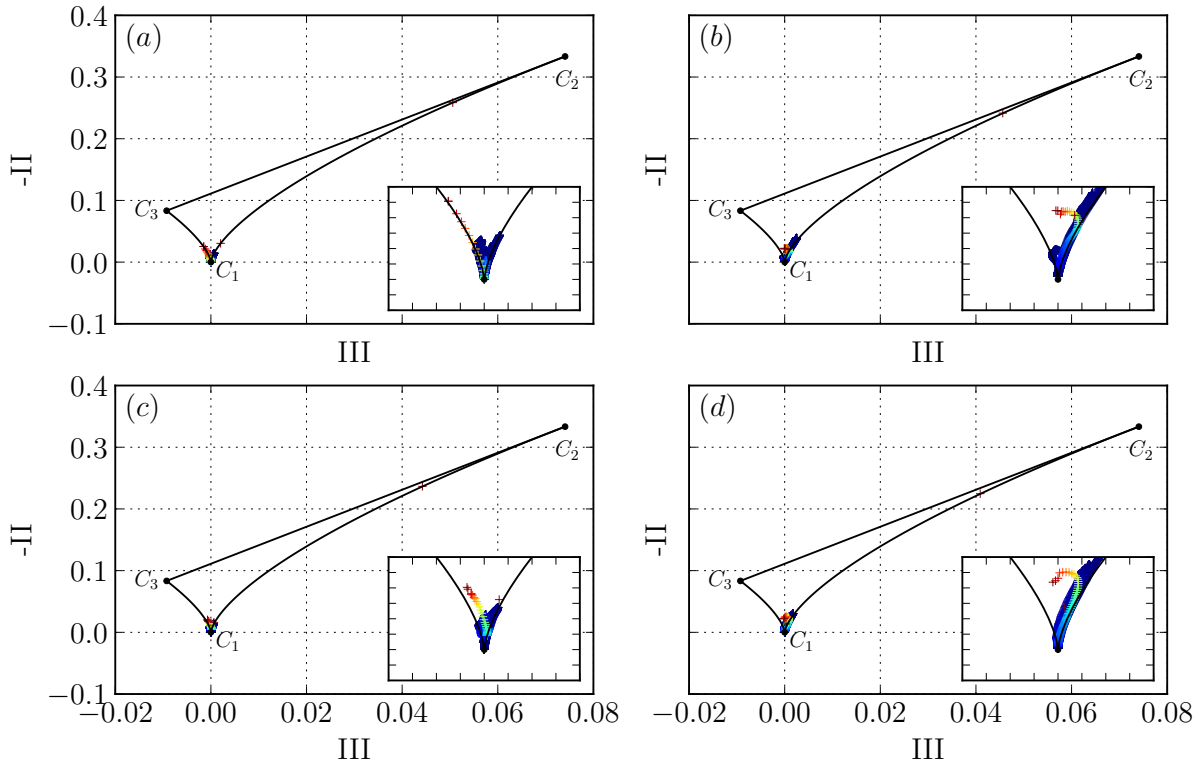


FIGURE 6.32 – Plan des invariants du tenseur d’anisotropie pour les différents mélanges. (a) $E_a/R_u T_0 = 20$, (b) $E_a/R_u T_0 = 30$, (c) $E_a/R_u T_0 = 38.23$ et (d) $E_a/R_u T_0 = 48$.

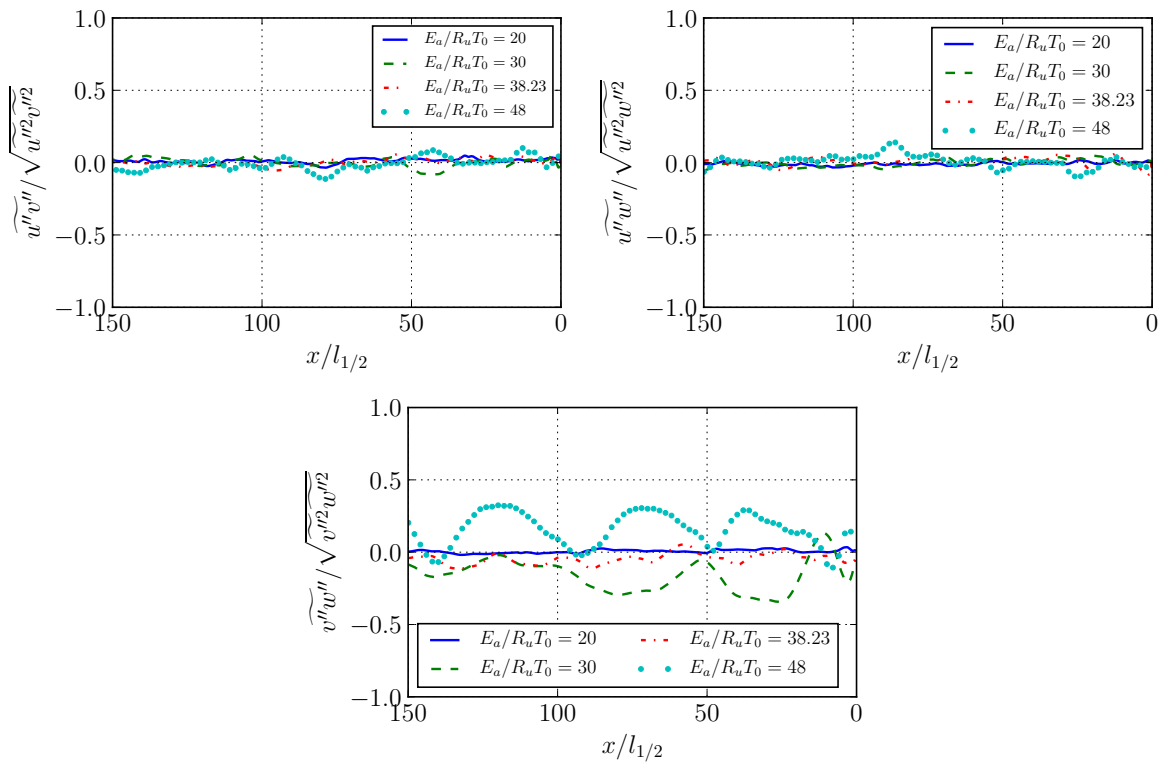


FIGURE 6.33 – Évolution des coefficients de corrélation entre des variables de fluctuations des vitesses pour les différents mélanges dans la configuration 3-D.

de détente, les oscillations de pression sont amplifiées par le dégagement de chaleur. En revanche, si le dégagement d'énergie et les fluctuations de pression sont en opposition de phase, l'apport de chaleur atténue les fluctuations acoustiques. Dans l'optique d'améliorer ce critère, Chu [290] suggéra que ce sont les fluctuations de température et celles du taux de dégagement de chaleur qui déterminent l'amplification des instabilités ou leur atténuation. Nicoud et Poinso [291] ont affirmé que le critère de Rayleigh doit être étendu pour inclure les variations de type entropique et ont préconisé l'utilisation de l'énergie des fluctuations de Chu dans les études sur les instabilités de combustion. Cette énergie totale des fluctuations peut s'écrire de la manière suivante (autour d'un état ρ_0, p_0 et T_0) :

$$E_c = \underbrace{\frac{1}{2}\rho_0 u_i'^2}_{E_k} + \underbrace{\frac{1}{2}\rho_0 c_0^2 \frac{p'^2}{\gamma p_0}}_{E_p} + \underbrace{\frac{\gamma-1}{2\gamma} p_0 \frac{S'^2}{R_u^2}}_{E_S} \quad (6.11)$$

avec les fluctuations d'entropie pouvant être déterminées de la façon suivante (Eq. 15 de Chu [290])

$$\frac{c_0^2}{\gamma \rho_0} \rho'^2 + \frac{\rho_0 c_v}{T_0} T'^2 = \frac{\gamma-1}{\gamma} p_0 \left(\frac{S'}{R} \right)^2 + \frac{\rho_0 c_0^2}{(\gamma p_0)^2} p'^2 \quad (6.12)$$

Les trois termes composant l'énergie totale E_c sont respectivement, l'énergie cinétique E_k , l'énergie potentielle E_p et l'énergie liée aux fluctuations d'entropie E_S . Cette énergie de Chu est définie positive et en absence d'échanges sur les frontières, est monotone et constante dans le temps. George et Sujith [292] ont également démontré que les trois composantes E_k , E_p et E_S sont orthogonales et indépendantes.

Les différentes composantes seront évaluées de la façon suivante dans nos configurations :

$$E_c = \underbrace{\frac{1}{2}\overline{\rho u_i'' u_i''}}_{E_k} + \underbrace{\frac{1}{2}\overline{\rho \tilde{c}^2} \frac{\overline{p'^2}}{(\gamma \bar{p})^2}}_{E_p} + \underbrace{\frac{1}{2} \frac{\gamma-1}{\gamma} \bar{p} \frac{\overline{S'^2}}{R_u^2}}_{E_S} \quad (6.13)$$

avec

$$\frac{\tilde{c}^2}{\gamma \bar{\rho}} \overline{\rho'^2} + \frac{\bar{\rho} c_v}{\bar{T}} \overline{T'^2} = \frac{\gamma-1}{\gamma} \bar{p} \frac{\overline{S'^2}}{R^2} + \frac{\bar{\rho} \tilde{c}^2}{(\gamma \bar{p})^2} \overline{p'^2} \quad (6.14)$$

La Figure 6.34a présente l'évolution de l'énergie totale de Chu E_c en fonction de la distance normalisée par la demi-longueur de réaction $l_{1/2}$. Les amplitudes obtenues augmentent avec l'énergie d'activation. Le maximum est atteint autour d'une demi-longueur de réaction $l_{1/2}$, qui se situe dans la largeur à mi-hauteur de $\tilde{\omega}$. E_c décroît avec $E_a/R_u T_0$. On constate également que le pic de E_c peut être adimensionné par $(E_a/R_u T_0)$ et que les profils sont

proches entre 0 et $2 l_{1/2}$. Ce constat met en évidence la contribution du taux de dégagement de chaleur dans l'énergie totale des fluctuations. La contribution des fluctuations

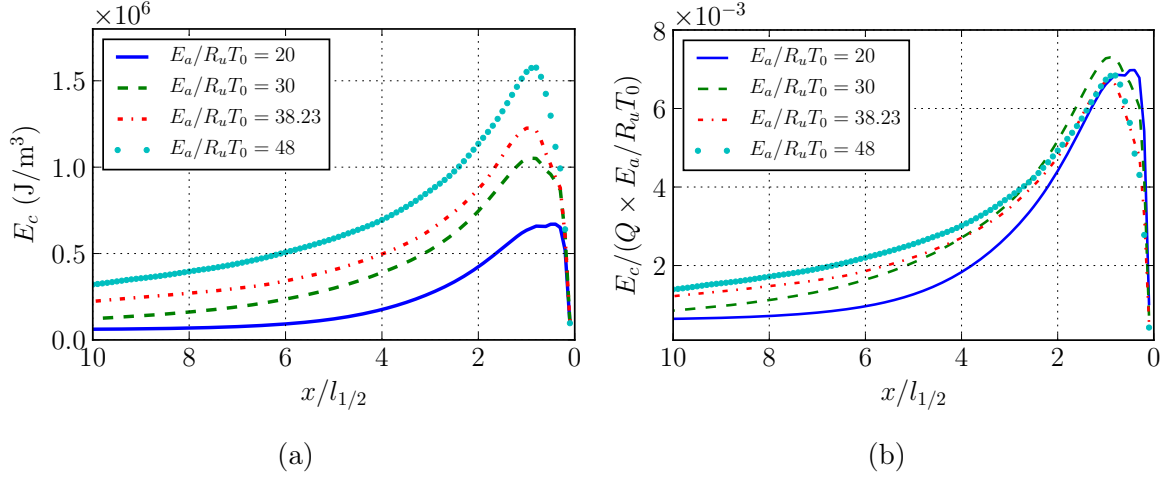


FIGURE 6.34 – (a) : Profils de l'énergie totale de Chu, (b) : profils de l'énergie totale de Chu divisée par la chaleur de réaction Q et l'énergie d'activation réduite $E_a/R_u T_0$. Les distances normalisée la demi-longueur de réaction $l_{1/2}$.

thermodynamiques à l'énergie totale est étudiée en utilisant l'équation 6.14 adimensionnée sous la forme suivante :

$$\underbrace{\frac{\gamma - 1}{\gamma} \left(\frac{S'}{R} \right)^2}_{\tau_S} = \underbrace{\left(\frac{\rho'}{\bar{\rho}} \right)^2}_{\tau_\rho} + \underbrace{\frac{1}{\gamma - 1} \left(\frac{T'}{\bar{T}} \right)^2}_{\tau_T} - \underbrace{\frac{1}{\gamma} \left(\frac{p'}{\bar{p}} \right)^2}_{\tau_p} \quad (6.15)$$

La Figure 6.35 met en évidence ces différentes contributions en fonction de la distance normalisée par la demi-longueur de réaction $l_{1/2}$ pour les différentes énergies d'activation. On constate tout comme E_c que l'amplitude de ses différentes composantes augment avec l'énergie d'activation et que les maximums se situent dans la largeur à mi-hauteur du taux de dégagement de chaleur. Les fluctuations de température, puis celle de masse volumique représentent la contribution la plus importante dans les fluctuations d'entropie. Les trois contributions énergétiques E_k , E_p et E_s de l'énergie de Chu sont présentées dans la Figure 6.36. Ces quantités sont normalisées par $\rho_0 D_{CJ}^2$ pour les quatre mélanges étudiés. L'évolution de ces énergies peut être décomposée en deux phases. La première se situe relativement proche du choc. Immédiatement en aval du choc, l'énergie cinétique est la plus importante. Puis des fluctuations d'entropie sont produites, suite au dégagement de chaleur qui constituent la contribution la plus importante. En s'éloignant du choc, les fluctuations décroissent à un niveau très bas. De façon générale, l'amplitude des fluctuations augmente avec la sensibilité du mélange. Les rapports F_1 , F_2 et F_3 présentés dans la Figure 6.37

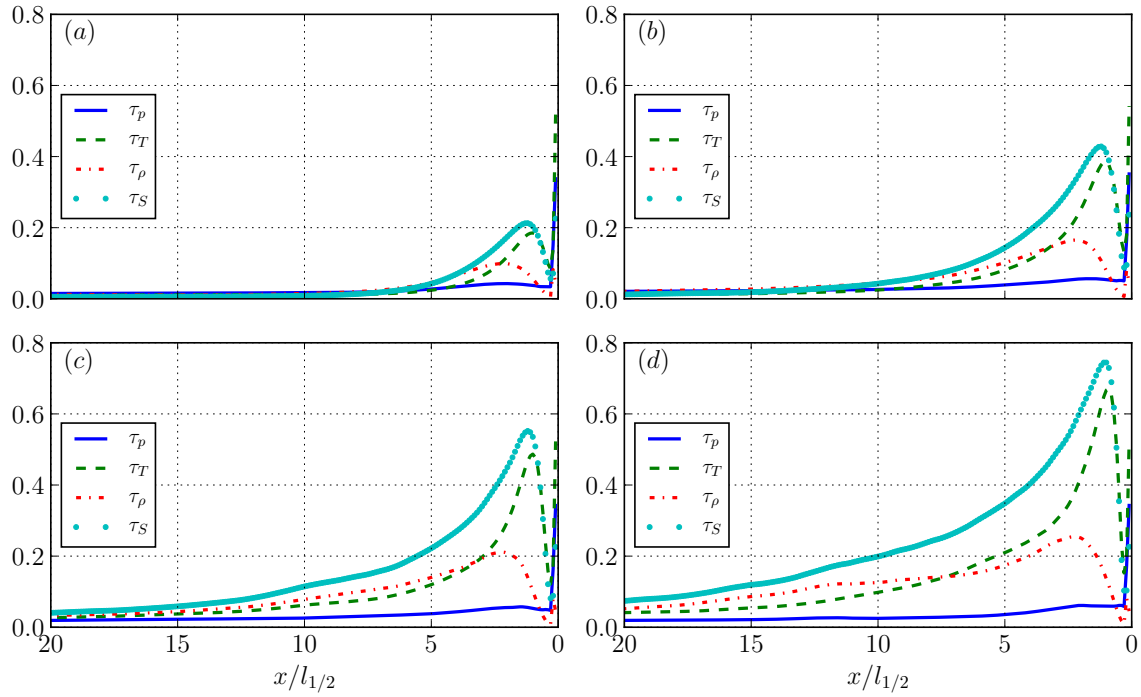


FIGURE 6.35 – Profils des contribution $\tau_S, \tau_T, \tau_\rho, \tau_p$, pour les différentes énergie d’activation. (a) : $E_a/R_u T_0 = 20$, (b) $E_a/R_u T_0 = 30$, (c) : $E_a/R_u T_0 = 38.23$ et (d) : $E_a/R_u T_0 = 48$.

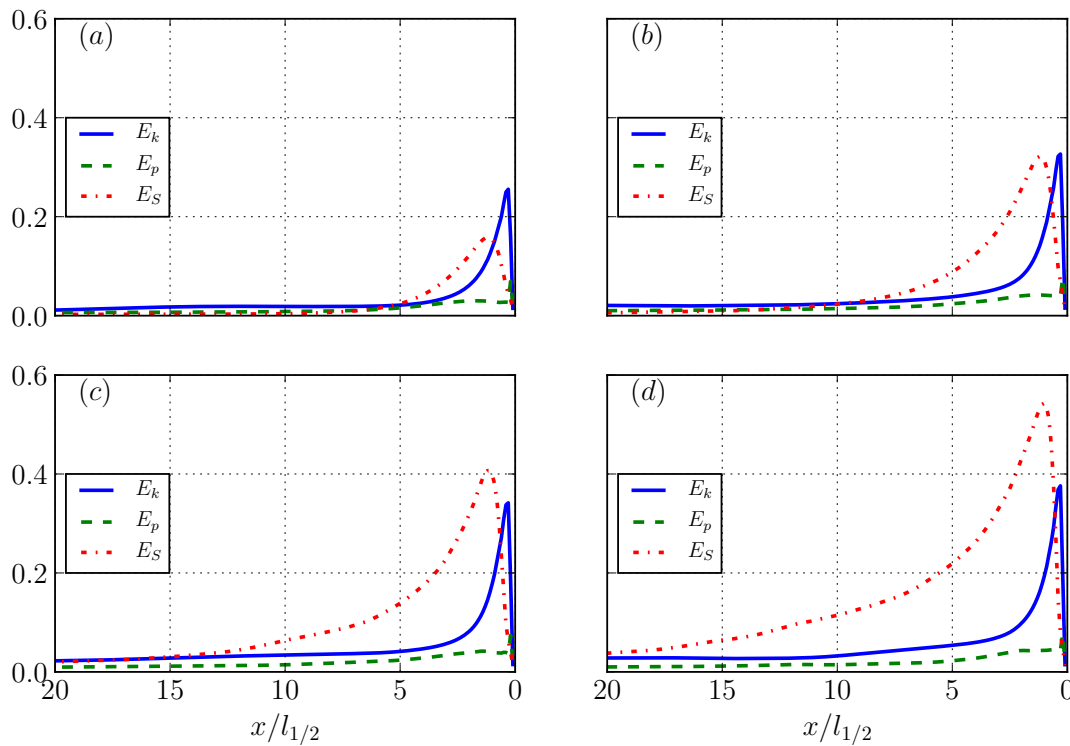


FIGURE 6.36 – Évolution des trois contributions d’énergie des fluctuations de Chu [290] normalisées par $\rho_0 D_{CJ}^2$ pour les quatre mélanges étudiés. (a) : $E_a/R_u T_0 = 20$, (b) $E_a/R_u T_0 = 30$, (c) : $E_a/R_u T_0 = 38.23$ et (d) : $E_a/R_u T_0 = 48$.

permettent de comparer les différentes contributions entre elles :

$$F_1 = \frac{E_k}{E_p}; F_2 = \frac{E_p}{E_S}; F_3 = \frac{E_S}{E_k} \quad (6.16)$$

Le terme F_1 introduit par Sarkar et al. [293] dans une configuration de turbulence compressible, représente le rapport entre l'énergie cinétique et l'énergie potentielle des fluctuations. Pour une répartition équilibrée entre l'énergie cinétique et l'énergie potentielle, la valeur de ce terme tend vers 2. Cela signifie que les fluctuations des pressions sont reliées aux fluctuations des vitesses $\sqrt{p'^2} = (\bar{\rho}\tilde{c}\sqrt{2k})$. Pour une détonation monodimensionnelle, Reynaud [99] a montré que F_1 tend vers un à mesure que l'on s'éloigne du choc. Les simulations 3-D montrent qu'initialement, l'énergie cinétique est en moyenne 8 fois plus importante que l'énergie potentielle derrière le choc. Cette différence diminue rapidement jusqu'à ce que F_1 atteigne une valeur entre 2 et 2.5. L'énergie cinétique diminue ainsi jusqu'à atteindre des valeurs du même ordre de grandeur que l'énergie potentielle. Le caractère oscillatoire de la courbe loin du choc pourrait provenir de la présence des ondes transverses. En effet, ces oscillations sont plus marquées dans le cas d'un mélange stable. Le rapport F_2 suit un comportement inverse à celui du rapport F_1 . Proche du choc, les fluctuations de l'énergie potentielle sont très inférieures aux fluctuations entropiques issues du dégagement de chaleur. En s'éloignant du choc, les fluctuations entropiques diminuent provoquant une augmentation rapide du rapport F_2 . Lorsque les fluctuations sont quasi-isentropiques, ce rapport avoisine le rapport F_1 . L'analyse du profil du rapport $F_3 = (F_1.F_2)^{-1}$ nous renseigne sur la compétition entre les fluctuations entropiques issues du dégagement de chaleur et l'énergie cinétique des fluctuations. Les fluctuations entropiques sont plus importantes que les fluctuations d'énergie cinétique dans la zone de réaction. Le rapport F_3 devient d'autant plus important à mesure que l'énergie d'activation est importante allant de 2 jusqu'à 4.5. À mesure que l'on s'éloigne de la zone du dégagement de chaleur, le rapport diminue fortement lorsque le comportement des fluctuations devient quasi-isentropique.

Le rapport F_1 tend vers la valeur de 2 assez rapidement, au bout de $5l_{1/2}$, en aval du pic du taux de dégagement de chaleur. Dans un autre contexte de turbulence compressible décroissante (faible M_t et nombre de Reynolds basé sur une grande échelle de Taylor) et forcée ($M_t > 0.3$), Jagannathan et Donzis [294] ont montré que cette équirépartition entre ces deux énergies se produisait également. Dans les conditions de détonation, le nombre de Mach turbulent dépasse largement cette valeur critique proche du choc. Il est ainsi possible que cet équilibre se maintienne ensuite tout au long, bien que le nombre de Mach turbulent chute à 0.15-0.2 par la suite.

Le rapport F_2 (traduisant les fluctuations d'entropie) relaxe vers sa valeur finale aux

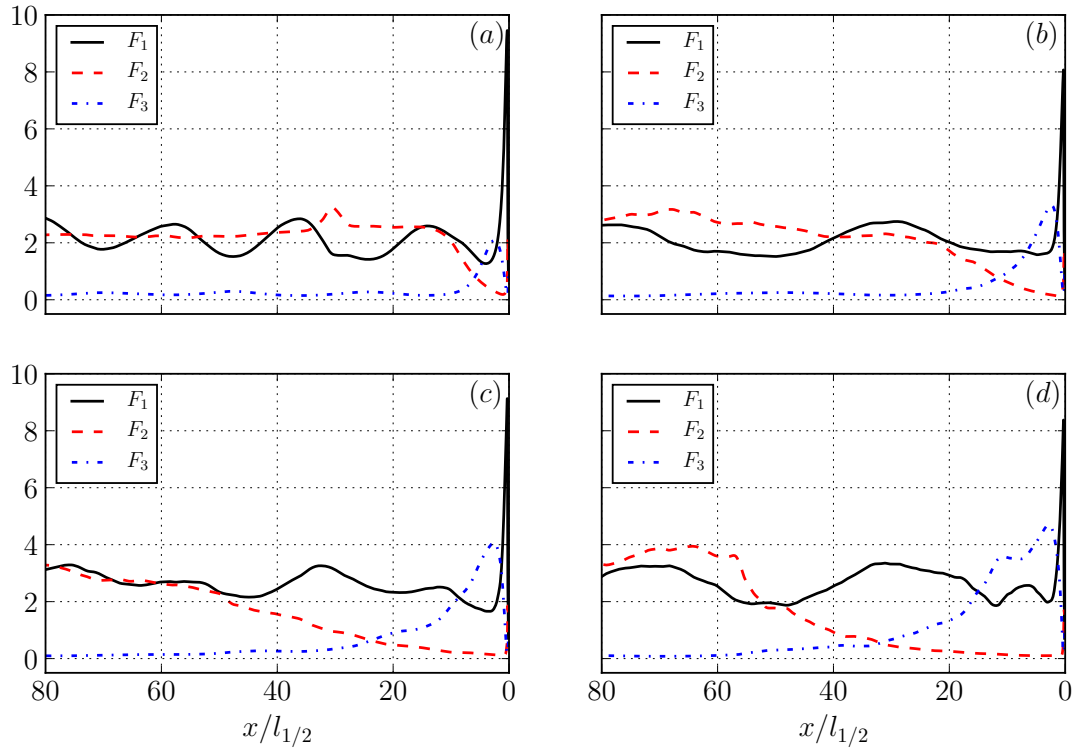


FIGURE 6.37 – Évolution des rapports des différentes énergies des fluctuations en fonction de la distance pour différentes énergies d’activation. (a) $E_a/R_u T_0 = 20$, (b) $E_a/R_u T_0 = 30$, (c) $E_a/R_u T_0 = 38.23$ et (d) $E_a/R_u T_0 = 48$.

alentours de l’épaisseur hydrodynamique. Il peut être obtenu en conjuguant les différentes relations des coefficients polytropiques Eqs 6.7 et 6.8

6.4.6 Échelle de Taylor

La micro-échelle de Taylor est définie suivant chaque direction d’écoulement par [295] :

$$\lambda_i = \sqrt{\frac{\overline{u_i''^2}}{\left(\frac{\partial u_i''}{\partial x_i}\right)^2}} \quad (6.17)$$

L’évolution des trois composantes de cette échelle suivant la direction longitudinale derrière le choc précurseur est mise en évidence dans la Figure 6.38. Les valeurs sont normalisées par la demi-longueur de réaction $l_{1/2}$. Les profils montrent que ces échelles sont initialement petite en aval du choc puis croissent rapidement pour se stabiliser à des valeurs constantes. Ce constat est similaire pour les trois échelles.

Jin et al. [296] ont étudié l’influence de l’interaction de la détonation des écoulements turbulents à intensité (M et M_t) variable. Les auteurs ont montré que l’échelle de Taylor

transversale est supérieure à la longitudinale. En outre, les valeurs à laquelle ces quantités relaxent derrière la détonation sont sensiblement supérieures à celle de la turbulence injectée en amont. Cette observation suggère que les vortex engendrés par la détonation dominent les fluctuations de l'amont. L'influence de la sensibilité à la température du mélange sur cette micro-échelle a été étudiée par Massa et Lu [297]. Les auteurs ont montré que les amplitudes obtenues croissent avec la sensibilité du mélange. Ces deux effets sont également observés dans nos simulations. Les oscillations des échelles transverses sont liées aux oscillations périodiques des ondes transverses, et de leurs collisions qui induisent des zones de compression.

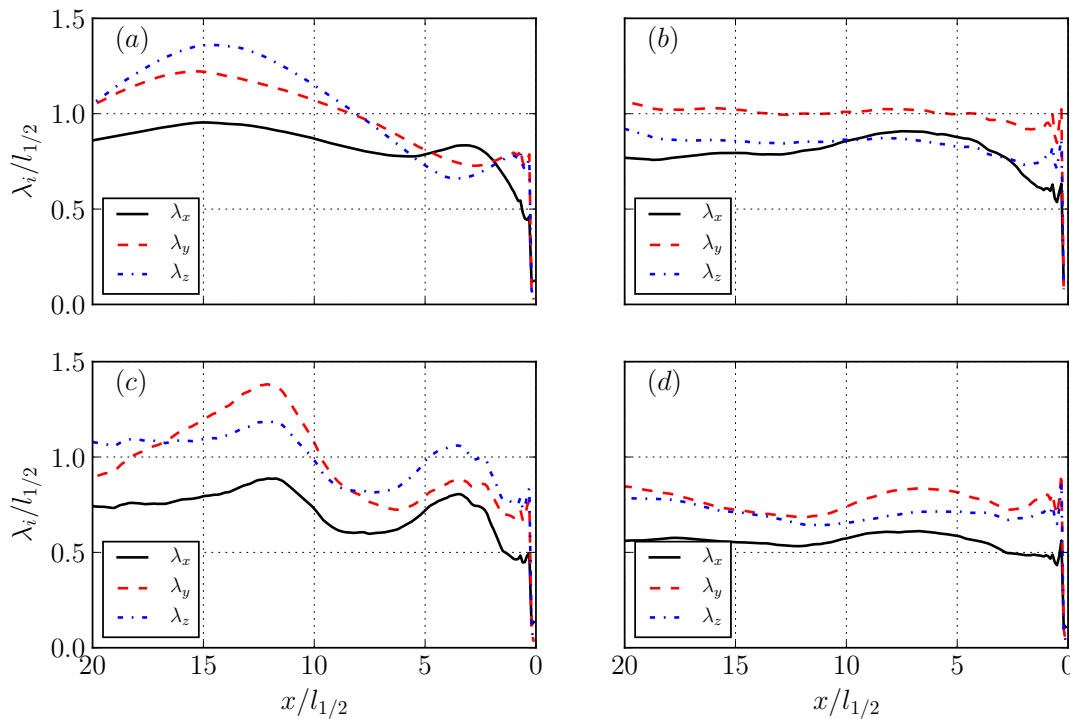


FIGURE 6.38 – Évolution de la micro-échelle de Taylor λ_i ($i = x, y, z$ pour chaque direction d'espace) normalisée par la demi-longueur de réaction pour différents mélanges, en aval du choc. (a) : $E_a/R_u T_0 = 20$, (b) : $E_a/R_u T_0 = 30$, (c) : $E_a/R_u T_0 = 38.23$ et (d) : $E_a/R_u T_0 = 48$.

6.5 Topologie de la détonation non-idéale

Cette section est consacrée aux détonations non-idéales et plus particulièrement aux détonations confinées par gaz inerte. Après avoir mis en évidence les différences et les similitudes existantes entre les configurations 2-D et 3-D dans un canal, nous allons réaliser une étude similaire avec une détonation qui subit des pertes latérales. Les paramètres thermodynamiques seront ceux de la section précédente.

Les simulations sont réalisées en deux étapes. La première consiste à amorcer une détonation dans un canal entièrement composé d'un mélange réactif, jusqu'à obtenir une détonation auto-entretenu. Ensuite, les champs résultants sont utilisés comme des conditions initiales pour propager une détonation dans un milieu constitué de deux couches disposées l'une sur l'autre. La couche inférieure est composée du pré-mélange réactif tandis que la seconde est composée d'un gaz inerte. Cette seconde couche est portée à une température $T_{\text{inert}} = 124$ K afin d'obtenir une impédance acoustique similaire à celle d'un pré-mélange $\text{H}_2 - \text{O}_2$ surplombé par l'air. Le schéma de principe ainsi qu'une description plus approfondie de la méthode ont été présentés dans la section 5.2 du chapitre 5. Il est rappelé ci-dessous.

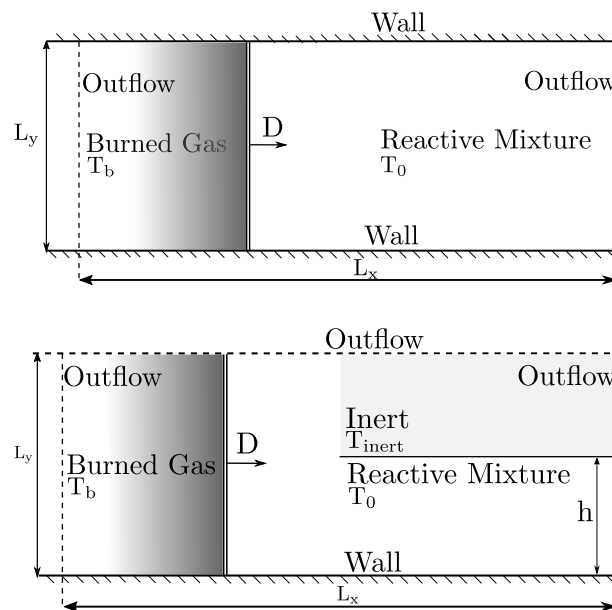


FIGURE 6.39 – Schéma représentatif de la stratégie suivie dans les simulations.

6.5.1 Caractéristiques générales

Dans le cas des simulations bidimensionnelles, une étude paramétrique a été réalisée avec des dimensions variables pour chaque mélange. Le Tableau 6.5 regroupe les dimensions retenues. La résolution numérique est similaire à celle de la section précédente à savoir $10 \text{ pts}/l_{1/2}$. Dans le cas 3-D, nous avons opté pour une configuration de détonation à $E_a/R_u T_0 = 30$. En effet, pour des mélanges moyennement instables, le coup du calcul devient importants. Les dimensions du domaine sont de $L_x \times L_y \times L_z = 20 \text{ mm} \times 20 \text{ mm} \times 2 \text{ mm} = 220 l_{1/2} \times 220 l_{1/2} \times 22 l_{1/2}$ (voir Tableau 6.6). Le nombre total de mailles est de 1.07 milliard. Le nombre d'heures CPU nécessaire est d'environ 1.8 million avec une

TABLE 6.5 – Dimensions des simulations 2-D semi-confinées.

E_a/R_uT_0	L_x (mm)	L_y (mm)	$L_x/l_{1/2}$	$L_y/l_{1/2}$	mailles
20	20	15	220	165	3.64×10^6
30	20	30	220	330	7.27×10^6
38.23	20	40	220	440	9.70×10^6
48	20	50	220	550	12.12×10^6

répartition de 30% dédiée aux simulations 2-D et de 70% dédiée à la simulation 3-D.

TABLE 6.6 – Dimensions des simulations 3-D semi-confinées.

E_a/R_uT_0	L_x (mm)	L_y (mm)	L_z (mm)	$L_x/l_{1/2}$	$L_y/l_{1/2}$	$L_z/l_{1/2}$	mailles
30	20	20	2	220	220	22	$1\ 070 \times 10^6$

La Figure 6.40 présente les différents champs obtenus lorsque la détonation interagit avec le confinement inerte. La détonation est considérée quasi-stationnaire (vitesse de détonation D constante en moyenne) à cet instant dans le cas 2-D d'un mélange $E_a/R_uT_0 = 20$. Les figures correspondent aux champs de température normalisée, au gradient de masse volumique, à la fraction massique des gaz frais et à la vorticité normalisée. Les distances sont exprimées en fonction de la demi-longueur de réaction. Le front de détonation est situé à la droite du domaine de calcul. Il sépare les gaz frais des gaz brûlés comme l'atteste le champ de fraction massique des gaz frais 6.42. Le champ de température montre que les produits de détonation subissent non seulement des détentes en aval de la zone de réaction mais également des détentes latérales qui proviennent de l'expansion latérale des produits en direction du confinement. En effet, un faisceau de détentes de type Prandtl-Meyer est centré à l'interface qui sépare les gaz frais du confinement. La présence de ces détentes et la divergence des trajectoires matérielles va entraîner la courbure du front de choc. Un choc oblique attaché au front de détonation est formé dans le gaz inerte (voir Schlieren de masse volumique 6.40b). Le front de détonation est caractérisé par des points triples et des ondes transverses. Une couche de mélange est formée entre les gaz brûlés issus de la détonation des gaz qui traversent le choc oblique. Il est à noter que cette couche de mélange présente une nouvelle contribution à la formation des structures tourbillonnaires dans l'écoulement. Ainsi, à la formation periodique des structures tourbillonnaires engendrées par les interactions des triples s'ajoutent ceux de la couche du mélange. Dans cette zone, deux échelles sont observées. La première échelle provient de l'interaction des points triples avec l'interface. La seconde échelle semble provenir, en l'absence de cisaillement, d'une perturbation de la ligne de glissement par les ondes transverses. Finalement, ce mélange exhibe peu de poches de gaz imbrûlés malgré la présence des pertes latérales.

L'augmentation de la sensibilité provoque un changement dans la structure de la détonation. La Figure 6.41 met en évidence un champ instantané de simulation 2-D pour un mélange à $E_a/R_u T_0 = 30$. Le front se distingue du mélange précédent par une augmentation du rayon de courbure global et la présence de poches de gaz imbrûlés derrière le front de détonation. La structure tourbillonnaire est moins organisée et une production accrue est constatée derrière le front de détonation et sur l'interface. Le champ de gradient de masse volumique montre des zones de réaction plus étendues que celles observées avec le mélange $E_a/R_u T_0 = 20$. Ce constat est d'autant plus apparent avec l'augmentation de l'énergie d'activation. Les champs instantanés sont fournis dans l'Annexe E pour les deux mélanges restants à savoir $E_a/R_u T_0 = 38.23$ et $E_a/R_u T_0 = 48$. La structure cellulaire

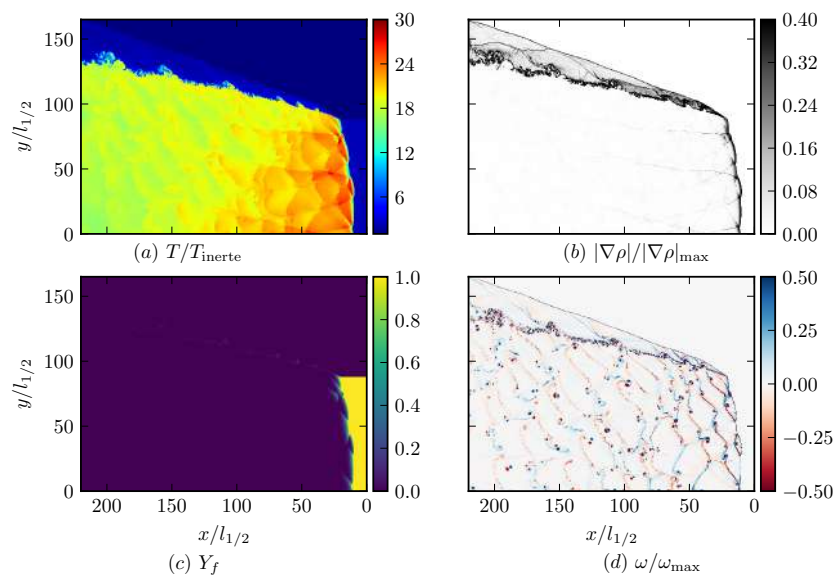


FIGURE 6.40 – Visualisation de la détonation 2-D dans un milieu confiné par un gaz inerte. Le mélange considéré correspond à $E_a/R_u T_0 = 20$. La hauteur réactive est de $h_r = 8 \text{ mm} = 88 l_{1/2} \approx 4.5 \lambda$.

produite après l'interaction de ces mélanges avec la couche inerte est mise en évidence dans la Figure 6.42. La comparaison de la régularité des cellules entre chaque mélange avec le cas du canal révèle une diminution de la régularité (voir Figure 6.40). Cet effet est bien marqué sur un mélange régulier $E_a/R_u T_0 = 20$. Les hauteurs réactives h_r nécessaires pour propager les mélanges croissent avec l'énergie d'activation comme l'atteste les lignes rouges qui délimitent les gaz frais de la couche inerte. Ainsi, les mélanges instables nécessitent plus de cellules et de points triples pour s'auto-entretenir. Une étude paramétrique a été menée pour retrouver les hauteurs critiques de propagation. Plusieurs hauteurs réactives sont ainsi testées pour chaque mélange. Lorsque celles-ci sont en dessous de la hauteur critique la détonation se propage plus. L'extinction est obtenue lorsque un découplage complet a lieu entre le choc précurseur et la zone de réaction. La Figure 6.43 regroupe les

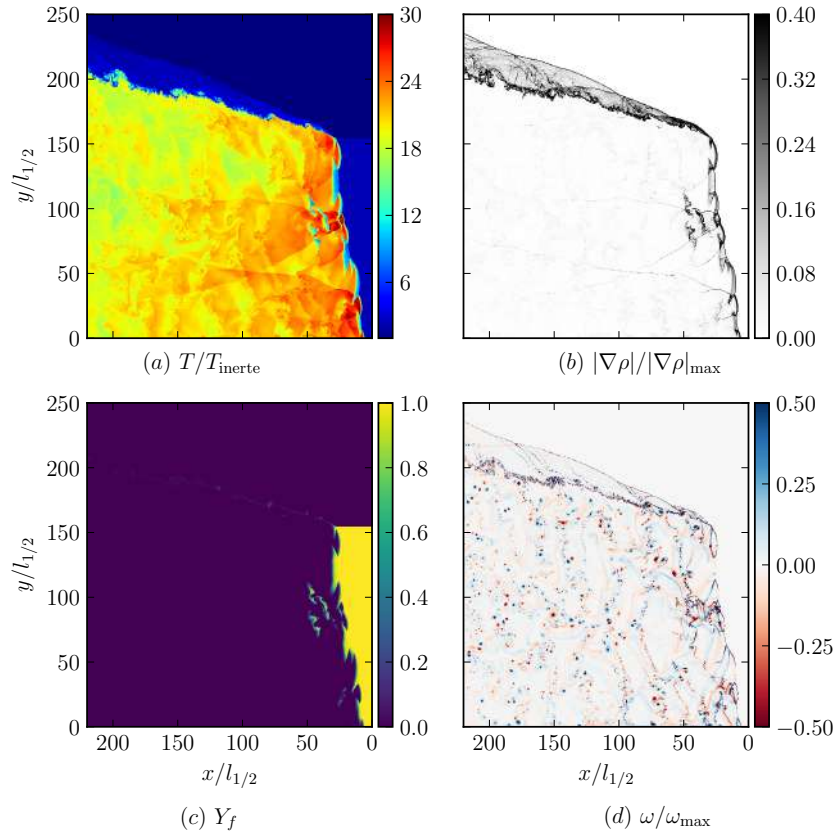


FIGURE 6.41 – Visualisation de la détonation 2-D dans un milieu confiné par un gaz inerte. Le mélange considéré correspond à $E_a/R_u T_0 = 30$. La hauteur réactive est de $h_r = 14 \text{ mm} = 154 l_{1/2} \approx 7 \lambda$.

hauteurs réactives étudiées pour chaque énergie d'activation. Une propagation réussie est présentée par un cercle, tandis qu'une extinction est présentée par une croix. La hauteur critique peut ainsi être retrouvée. Les résultats confirment les observations précédentes où la couche réactive nécessaire pour propager la détonation est plus importante pour les mélanges instables. La structure 3-D de la détonation est mise en évidence dans la Figure 6.44. Le choc précurseur de la détonation (bleu) et le choc oblique formé dans les gaz inertes (rouge) sont présentés par des contours de pression. Le développement de la structure tourbillonnaire est présenté par des contours du critère Q , colorés par la température normalisée T/T_0 . Le mélange considéré a une énergie d'activation réduite de $E_a/R_u T_0 = 30$ avec une hauteur réactive de $h_r = 14 \text{ mm} = 7 \lambda = 77 l_{1/2}$. La projection frontale montre que le front de détonation est composée de plusieurs lignes de points triples qui se propagent dans la direction verticale du canal. Une ligne de points triples traverse tout le front verticalement de la paroi inférieure jusqu'au choc oblique. Cette ligne se propage dans la direction transversale (z) et sépare le front par des surfaces de Mach et de chocs incidents. La vue en perspective montre une structure tourbillonnaire issue du front similaire à celle observée dans le canal confiné. Les tourbillons qui s'enroulent

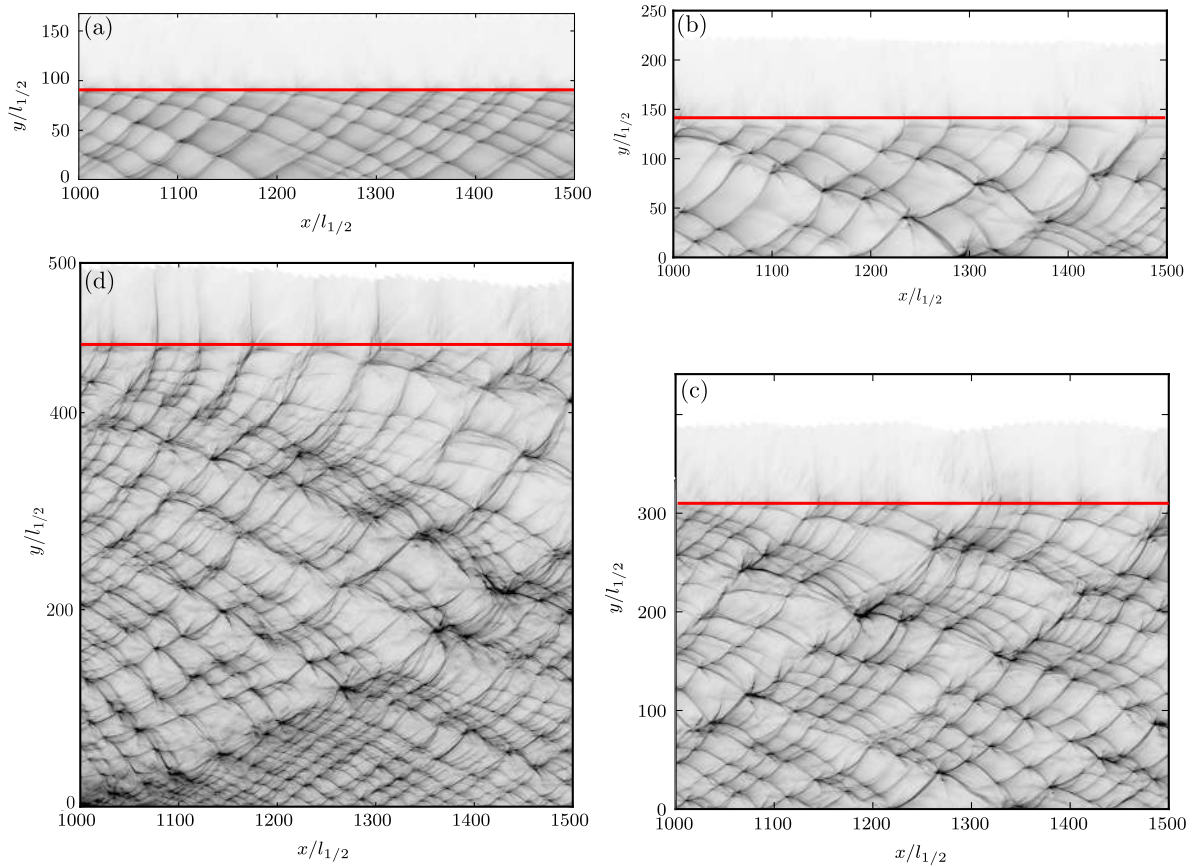


FIGURE 6.42 – Historique des maximums de pression illustrant la structure cellulaire de la détonation. Les distances sont normalisées par la demi-longueur de réaction. Les mélanges présentés sont (a) : $E_a/R_uT_0 = 20$, (b) : $E_a/R_uT_0 = 30$, (c) : $E_a/R_uT_0 = 38.23$ et (d) : $E_a/R_uT_0 = 48$ avec une organisation dans le sens des aiguilles d’une montre.

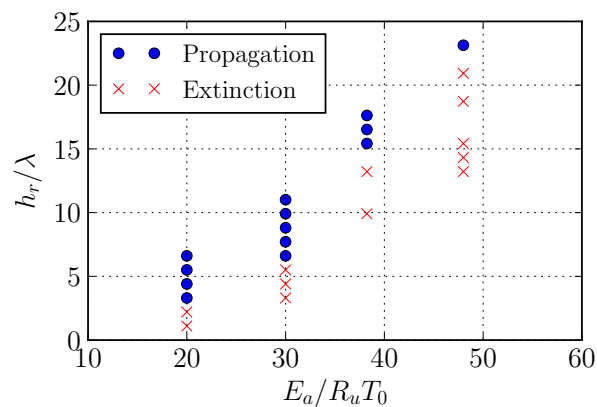


FIGURE 6.43 – Limites de propagations à travers la hauteur de la couche réactive normalisée par la taille moyenne de cellule pour chaque énergie d’activation.

derrière les lignes de points triples sont arrachés et convectés en aval. Ces derniers se décomposent rapidement à mesure qu’elles s’éloignent du front. La couche de mélange qui sépare les gaz brûlés du gaz inerte issu du choc oblique est reconnue par les faibles niveaux de température. Le mécanisme de formation de ces structures est similaire à celui

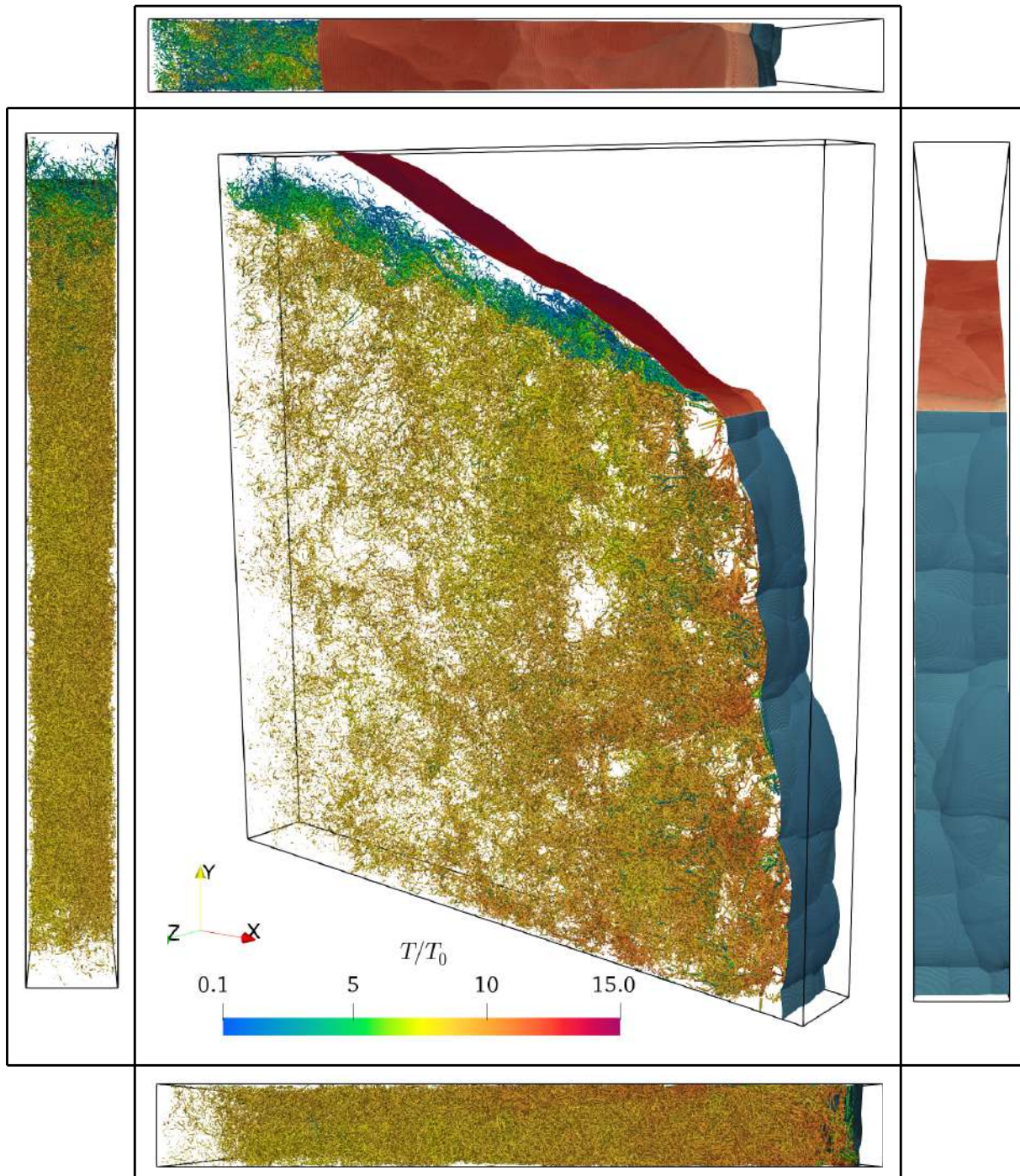


FIGURE 6.44 – Visualisation du front de détonation et de la structure tourbillonnaire engendré pour l'énergie d'activation $E_a/R_u T_0 = 30$. Iso-surface du critère Q avec $Q_{\text{iso}} = 7 \times 10^{-3} Q_{\text{max}}$ coloré par la température.

du cas 2-D. En effet, elles sont issues des interactions des lignes de points triples et les ondes transverses avec l'interface.

La Figure 6.45 présente un agrandissement autour de la couche de mélange entre les produits de détonation et les gaz issus du choc oblique. Les structures tourbillonnaires à grande échelle qui se développent à l'interface sont issues des lignes de points triples.

Une flèche en couleur cyan pointe de 1. vers un tourbillon formé par l'interaction de la ligne de points triples horizontale qui est entrée en interaction avec l'interface aux instants précédents. Cette ligne de point triple se dirige à cet instant dans la direction verticale vers la paroi inférieure du canal (deuxième flèche de 1.). Le tourbillon ainsi formé prend la largeur de la surface de disque de Mach formé après cette réflexion. Il s'étend ainsi de la paroi gauche du canal jusqu'à la ligne de points triples verticale. Les flèches en cyan qui pointent à partir de 2. mettent en évidence la formation de la structure tourbillonnaire issue du déplacement horizontal de la ligne de points triples verticale. En effet, ce tourbillon entame sa formation lorsque cette ligne interagit avec la paroi de droite (l'endroit ou pointe la première flèche) puis s'étend jusqu'à la paroi de gauche et revient vers la paroi de droite (deuxième flèche). La structure tourbillonnaire est engendrée par un aller retour de cette ligne de point triples verticale (troisième flèche de 2.). L'ensemble de ces tourbillons va par la suite se décomposer en aval en un ensemble de plus petites structures tourbillonnaires. Les tourbillons présentés en couleur rouge saturée sont ceux issus du front de détonation.

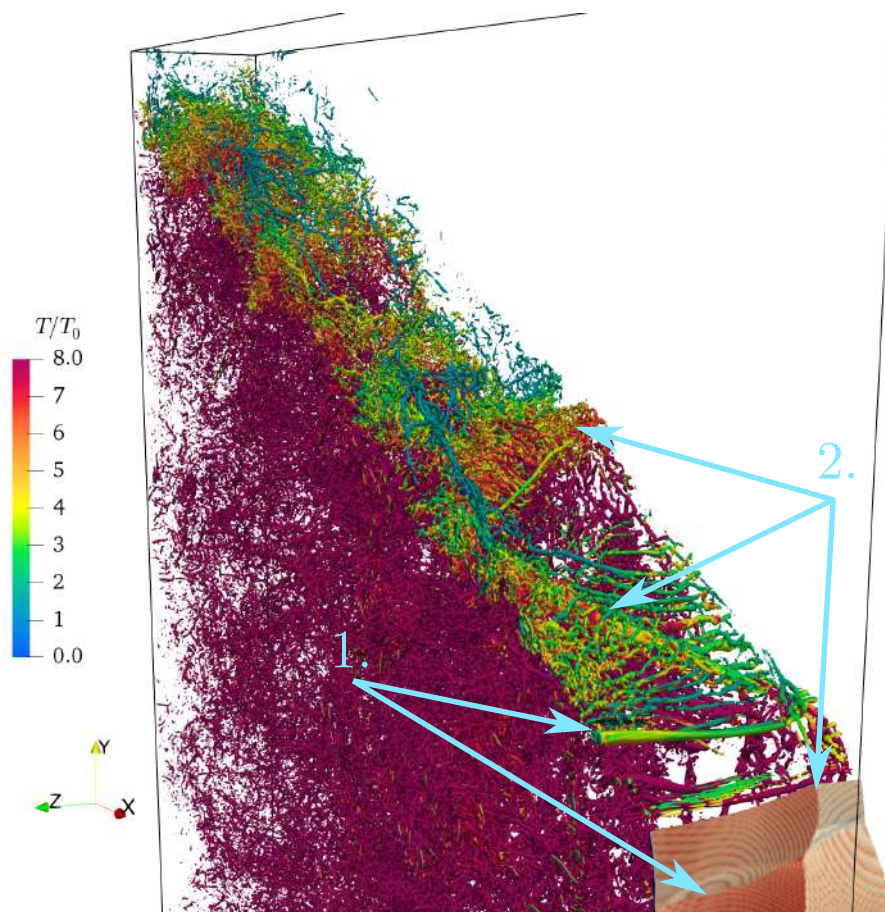


FIGURE 6.45 – Agrandissement sur la couche de mélange qui sépare les gaz brûlés du gaz inerte. Iso-surface du critère Q avec $Q_{\text{iso}} = 7 \times 10^{-3} Q_{\text{max}}$ coloré par la température.

6.6 Analyse des champs moyens des détonation non-idéales

La structure moyenne de l'écoulement non-idéale est étudiée dans cette section. La présence des pertes latérales par le confinement inerte se manifeste par une courbure du front de détonation. L'analyse du champ moyen est ainsi présentée avec un alignement sur la position moyenne du choc précurseur. La Figure 6.46 présente le champs 2-D de la température moyenne dans le repère moyen du choc incident pour deux mélanges à $E_a/R_u T_0 = 20$ et $E_a/R_u T_0 = 30$. L'expansion latérale des produits de détonation et les détente de Prandtl-Meyer sont responsables du gradient de température observé. La ligne noire représente la ligne sonique. Les lignes blanches représentent les lignes de courant. Après avoir été déviées par le choc courbe, elles se rapprochent de la paroi inférieure dans la poche subsonique, puis s'en éloignent au sein de la zone supersonique [298, 299]. En aval du choc courbe, l'écoulement est supersonique, et les lignes de courant sont quasi-droites. Le contour en couleur rouge délimite la position moyenne de la zone de réaction ($\tilde{Y} = 2 \times 10^{-3}$). Pour un mélange stable, la fin de la zone de réaction et le plan sonique sont confondus sur la paroi inférieure. Puis les lignes divergent, au fur et à mesure que l'on se rapproche de l'interface où les détente et le refroidissement associé sont importants.

Le constat est plus marqué dans le cas d'un mélange moins stable comme l'atteste la Figure 6.46b. Le plan sonique ainsi que la zone de réaction sont à des distances plus importantes que dans le mélange à $E_a/R_u T_0 = 20$.

6.6.1 Relation célérité courbure

L'analyse précédente a montré que les pertes subies par la détonation s'illustrent par la courbure moyenne du front. À cela s'ajoute un déficit de vitesse par rapport à l'état idéal de CJ. La Figure 6.47a présente le déficit de vitesse observé pour plusieurs hauteurs réactives normalisée par la demi-longueur de réaction pour les cas 2-D et le cas 3-D pour l'énergie le mélange à $E_a/R_u T_0 = 30$. Les résultats obtenus dans cette étude, où la température des gaz inerte est de $T_{\text{inerte}} = 124$ K permettent de compléter une base de données créée lors de la thèse précédente de Reynaud [99] et Reynaud et al. [300]. Le déficit de vitesse est une fonction décroissante de la hauteur réactive. Pour une même hauteur réactive, le mélange à température similaire à celle des gaz frais présente le déficit de vitesse le plus élevé. Ce constat s'explique par l'impédance acoustique entre les deux couches. En effet, lorsque les points triples interagissent avec le confinement inerte, une

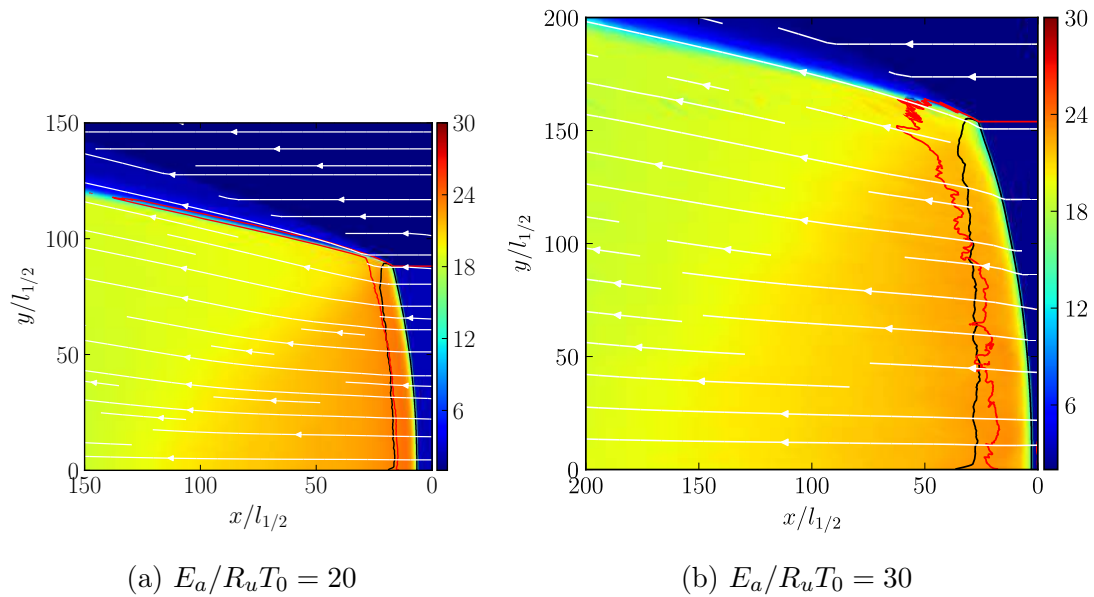


FIGURE 6.46 – Champs moyens de la température normalisée T/T_{inerte} de la détonation confinée par un gaz inerte. Le plan sonique est représenté en ligne noire, les lignes de courant en blanc et la zone de réaction en rouge.

impédance acoustique unitaire ($T_0 = T_{\text{inerte}}$) permet une absorption totale des points triples. En revanche, une impédance différente ($T_0 \neq T_{\text{inerte}}$) permet des réflexions de ces points triples et donc offre une résistance plus élevée à l’extinction. La configuration à température $T_{\text{inerte}} = 1400$ K offre la plus grande résistance et la plus petite hauteur critique puisque l’impédance acoustique dans ce cas est la plus élevée.

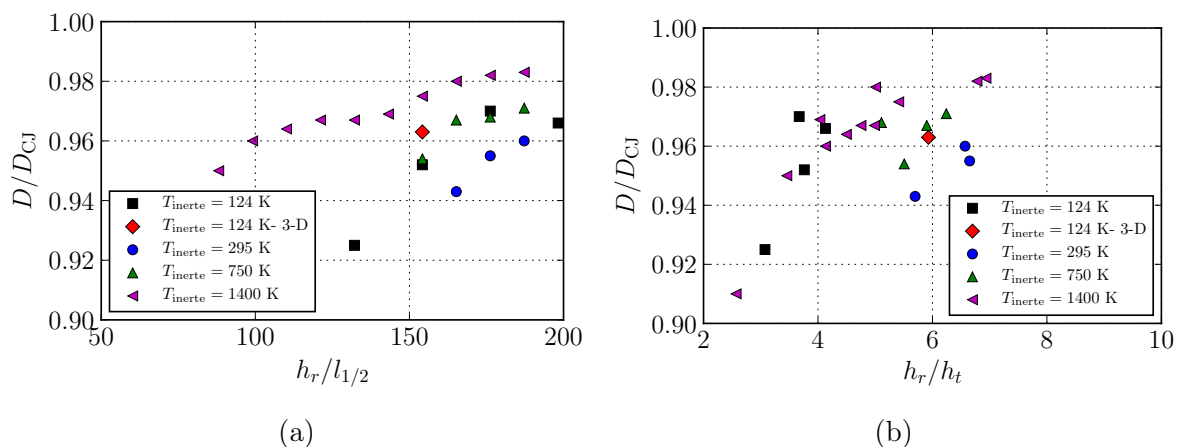


FIGURE 6.47 – Vitesse moyenne de la détonation en fonction de la courbure moyenne du front à $y = 0$ pour un mélange $E_a/R_u T_0 = 30$. (a) Normalisation par la demi-longueur de réaction, (b) normalisation par l’épaisseur hydrodynamique. Comparaison 2-D \square et 3-D \diamond pour un confinement à $T_{\text{inert}} = 124$ K et des confinements à différentes températures : $T_{\text{inerte}} = 295$ K \circ , $T_{\text{inerte}} = 750$ K \triangle et $T_{\text{inerte}} = 1400$ K \blacktriangleleft .

La simulation numérique 3-D offre un déficit de vitesse moins important que les

simulations 2-D à la même température comme l'atteste le point en forme de losange et de couleur rouge comparé au carré noir. Cela signifie que la présence d'un nombre de points dans l'écoulement suivant la troisième direction dans le cas 3-D permet de contrebalancer en partie les effets de pertes induites par l'expansion globale des produits de détonations. En effet, les interactions des instabilités cellulaires ont un effet double. Certes, la collision des ondes de choc transverses va engendrer des points chauds qui peuvent permettre de réamorcer les poches de gaz imbrûlées. Cependant, ces fronts réactifs vont également induire des détenteurs d'autant plus importantes que la dimension du problème augmente [301]. Il est ainsi possible que la topologie des points chauds 3-D soit différente de celles de la configuration 2-D. Il est également possible que ce moindre déficit soit lié à une épaisseur relativement petite ($\sim 2\text{mm} = \lambda$) dans la troisième direction à la présence de parois.

La Figure 6.47b expose l'évolution du déficit de vitesse en fonction de la hauteur réactive normalisée par l'épaisseur hydrodynamique. Cette épaisseur est estimée sur la paroi inférieure du canal (Figure 6.46). L'utilisation de cette échelle caractéristique permet de regrouper les données sur une bande plus étroite. Cependant, cette représentation montre une dispersion des résultats entre chaque T_{inerte} avec une difficulté d'observer une tendance quelconque.

Le déficit de vitesse augmente quand le rayon de courbure diminue (Figure 6.48a). L'adimensionnement du rayon de courbure \mathcal{R} par l'épaisseur hydrodynamique améliore la concentration des résultats. En outre l'influence de la température n'est plus visible. L'ensemble des cas est regroupé dans un amas autour d'une droite à pente négative.

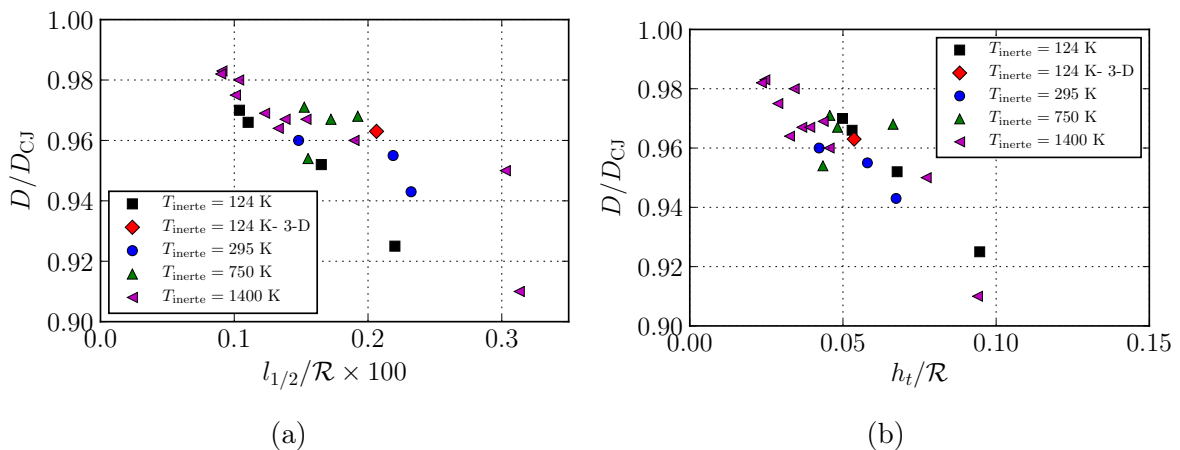


FIGURE 6.48 – Vitesse moyenne de la détonation en fonction de la courbure moyenne du front à $y = 0$ pour un mélange $E_a/R_u T_0 = 30$. (a) Normalisation de la courbure par la demi-longueur de réaction, (b) normalisation de la courbure par l'épaisseur hydrodynamique. Comparaison 2-D \square et 3-D \diamond pour un confinement à $T_{\text{inerte}} = 124$ K et des confinement à différentes températures : $T_{\text{inerte}} = 295$ K \circ , $T_{\text{inerte}} = 750$ K \triangle et $T_{\text{inerte}} = 1400$ K \triangleleft .

L'influence de l'adimensionnement est d'autant plus visible entre les simulations 2-D et la simulation 3-D. Le Figure 6.49 présente l'évolution du déficit de vitesse pour la température $T_{\text{inerte}} = 124$ K entre les deux configurations pour les deux adimensionnements. Lorsque le rayon de courbure est adimensionné par la demi-longueur (Figure 6.49a) de réaction, les points 2-D forment une droite à pente négative. La simulation 3-D montre une dispersion avec un rayon de courbure moins important pour le même déficit de vitesse. En effet, la topologie de l'écoulement semble affecter le rayon de courbure. Cependant, ce changement affecte l'épaisseur hydrodynamique. Cela permet ainsi de repositionner le point sur une courbe qui décrit l'évolution du déficit en fonction du rayon de courbure adimensionné par l'épaisseur hydrodynamique comme l'atteste la Figure 6.49b. L'intro-

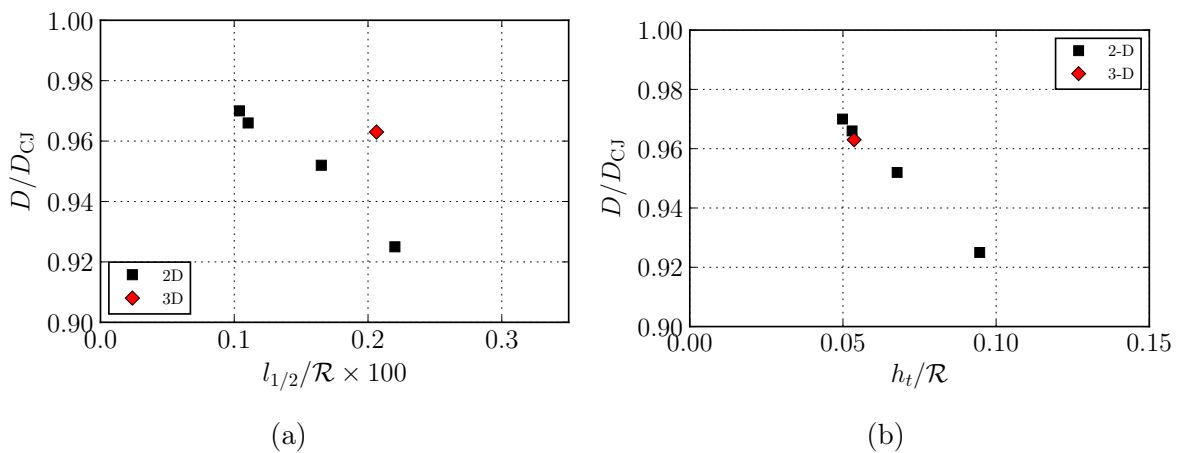


FIGURE 6.49 – Vitesse moyenne de la détonation en fonction de la courbure moyenne du front à $y = 0$ pour un mélange $E_a/R_u T_0 = 30$. (a) Normalisation de la courbure par la demi-longueur de réaction, (b) normalisation de la courbure par l'épaisseur hydrodynamique. Comparaison 2-D \square et 3-D \diamond pour un confinement à $T_{\text{inert}} = 124$ K

duction de l'épaisseur hydrodynamique a permis de passer d'une formulation du problème $D/D_{CJ} = f(h_r/l_{1/2}, T_{\text{inerte}}, y, z)$ à une formulation en $D/D_{CJ} = f(h_t/R)$ en 2-D. Cette étude a permis de montrer que cet adimensionnalisation restait valable en 3-D, et ce malgré l'ensemble des différences dans la topologie de l'écoulement qui ont été observées.

6.7 Synthèse partielle

Ce chapitre traite de l'influence des effets 3-D sur la détonation. Des simulations ont été conduites pour quatre mélanges d'énergie d'activation réduite croissante ($E_a/R_u T_0 = 20$, $E_a/R_u T_0 = 30$, $E_a/R_u T_0 = 38.23$, $E_a/R_u T_0 = 48$) dans la configuration d'une détonation marginale à section rectangulaire. Puis des simulations de détonation confinée par un gaz inerte ont été menées pour l'énergie d'activation réduite $E_a/R_u T_0 = 30$.

La première partie du chapitre est consacrée aux simulations de la configuration marginale. L'analyse des champs instantanés a mis en évidence une dynamique supplémentaire observée dans le cas 3-D par rapport aux simulations 2-D. En effet, les lignes de points triples qui se propagent sur le front suivant la direction transverse s'organisent pour former des modes appelés dans la littérature, mode rectangulaire et mode diagonal. Les deux modes se distinguent, lors de l'analyse de la structure cellulaire par la présence d'une "slapping wave", qui donne à la cellule une structure d'octaèdre et qui va se réfléchir sur les parois. Lorsque ce mélange devient instable, ces modes sont plus difficiles à distinguer et laissent place à des structures cellulaires moins régulières.

La structure tourbillonnaire qui se développe en aval du front de détonation a été étudiée à travers l'équation de vorticit . Dans le cas 2-D, cette  quation se simplifie en un scalaire dont les termes sources sont le couple barocline, l'expansion volum trique et la diffusion de la vorticit . Les deux premiers termes sont pr pond rants et deviennent rapidement constants et  quivalents. Le terme de diffusion qui a  t  estim  est d'un ordre de grandeur plus petit. Dans le cas 3-D, une contribution suppl mentaire dans l' quation de vorticit  issue de la d formation du tube de vorticit  alt re le comportement observ  dans le cas 2-D. En effet, ce terme de d formation est du m me ordre de grandeur que le terme d'expansion volum trique. Le terme barocline, initialement du m me ordre de grandeur que ces deux pr c dents termes d cro t rapidement, pour devenir du m me ordre de grandeur que le terme diffusif. Ces termes de production sont  galement d'un ordre de grandeur plus grand dans le cas 3-D par rapport au 2-D, le nombre d'ondes de choc (due   la pr sence entre autre, des "slapping waves") et de lignes de points triples  tant plus important. Ce constat met en  vidence l'importance des effets 3-D dans la formation des structures tourbillonnaires, notamment la contribution du terme de d formation des tubes de vorticit  qui joue un r le important dans le transfert  nerg tique des grosses structures vers les petites  chelles de la turbulence. En revanche, puisque le mod le utilis  est celui des  quations d'Euler, il serait n cessaire de r aliser des simulations avec le mod le de Navier-Stokes pour obtenir une estimation plus pr cise de la contribution du terme visqueux qui pourrait ainsi  tre important dans le cas de m langes tr s instables.

La structure moyenne de l' coulement a  t   tudi e   travers les moyennes conditionn es par la position instantan e de la surface du choc. Malgr  les diff rences observ es sur la structure instantan e, les profils moyens des grandeurs thermodynamiques et la fraction massique des gaz frais semblent co ncider quelque soit l' nergie d'activation du m lange entre les simulations 2-D et 3-D. L' volution de ces quantit s en fonction de la fraction massique est quasi-autosimilaire. Seule la r partition spatiale semble  tre affect e, et ce en fonction de l' nergie d'activation r duite. L' paisseur hydrodynamique, qui est la distance

entre les positions moyennes du choc et du plan sonique, varie comme $h_t/(l_{1/2} \cdot E_a/R_u T_0) \sim (E_a/R_u T_0)^\alpha$, où $\alpha = 0.7$ pour la 2-D et $\alpha = 0.46$ pour le 3-D. De plus l'analyse des profils nous indique que le taux de dégagement de chaleur est autosimilaire sur $l_{1/2}$, pendant lequel la fraction massique chute à $1/2$; puis semble également être autosimilaire entre 5 et 15 $l_{1/2}/(E_a/R_u T_0)^\alpha$ avec $\alpha = 0.46$ durant lequel \tilde{Y} chute à 0.1. On a un comportement autosimilaire pour une distance inférieure à $l_{1/2}$ pour la masse volumique, la température et la fraction massique. Lorsque le nombre de Mach s'approche de 1, en dépassant $1/\sqrt{\gamma}$, l'épaisseur hydrodynamique est une bonne candidate pour adimensionnaliser les résultats ($x/h_t \simeq 0.4-1$ et $\tilde{Y} < 5 \cdot 10^{-2}$) notamment pour la masse volumique et la fraction massique. L'épaisseur hydrodynamique apparaît ainsi comme une échelle externe ("outer scale").

L'énergie totale de Chu [290] est proposée pour quantifier les contributions relatives des fluctuations de l'écoulement. Cette quantité regroupe l'énergie cinétique turbulente, l'énergie potentielle liée aux fluctuations de pression et l'énergie des fluctuations d'entropie. En effet, les fluctuations de température qui sont directement proportionnelles aux fluctuations de fraction massique, constituant la plus importante contribution des fluctuations entropiques. Ainsi, elles sont issues du dégagement de chaleur proche du choc. Le pic des fluctuations qui peut être adimensionnalisé par $E_a/R_u T_0$ est atteint dans la largeur à mi-hauteur du taux de dégagement de chaleur. L'énergie de Chu peut atteindre $\sim 10\%$ de la chaleur de réaction. Elle décroît ensuite, tout comme les fluctuations d'entropie. On constate qu'un équilibre entre les énergies cinétiques turbulente et potentielle se produit assez rapidement, entre 5 et 10 $l_{1/2}$. Cette énergie des fluctuations pourrait constituer un réservoir énergétique, qui serait dissipé à plus petite échelle par des mécanismes dissipatifs [251, 302] tel que mis en évidence par l'étude de l'augmentation de vorticit  pour consommer les poches de gaz imbr l s dans le cas de m langes autrement plus instables que ceux  tudi s ici.

Au sein de la zone proche du choc o  s'effectue le d gagement de chaleur, les fluctuations de masse volumique et de temp rature qui sont les plus importants, sont anti-corr l s, indiquant un comportement quasi-isobare. Puis elles relaxent vers un comportement quasi-isentropique proche du plan sonique, o  le d gagement de chaleur devient faible.

Une troisi me  chelle pr sente dans l' coulement est associ e   la micro- chelle de Taylor. Les simulations ont montr  que celle-ci atteint une valeur stationnaire rapidement derri re le choc. La valeur de cette  chelle selon la direction de propagation se situe entre $1/2$ et $3/2$ $l_{1/2}$. Les  chelles transverses sont plus importantes que les  chelles longitudinales. Les fluctuations de vitesse sont d corr l es entre elles. L' nergie cin tique est initialement importante en aval du choc. Elle d cro t ensuite tout au long de la zone subsonique r active. L'analyse de l'anisotropie du tenseur de Reynolds, via le diagramme de Lumley montre

que les fluctuations des vitesses sont isotropes.

La deuxième partie de ce chapitre est consacrée aux détonations confinées par un gaz inerte. La configuration d'une détonation dans un mélange composé de deux couches, une réactive et l'autre inerte a été retenue. La sensibilité du mélange a fait l'objet d'une comparaison de la structure instantanée et moyenne pour des mélanges régulier et faiblement irrégulier. Une comparaison d'une simulation 2-D avec une simulation 3-D a été réalisée pour un mélange faiblement irrégulier.

Les pertes latérales entraînent une courbure du front de détonation. Les résultats 2-D ont montré que le rayon de courbure associé est d'autant plus important que la sensibilité du mélange augmente. La hauteur réactive nécessaire à l'entretien de la propagation est plus important lorsque le mélange devient instable. Cependant, les effets 3-D se manifestent par un déficit moindre de la vitesse de détonation.

Le déficit de vitesse induit a été étudié et des données supplémentaires ont alimenté une base de données déjà existante initiée par des travaux de thèse précédents [99]. Le déficit de vitesse est ainsi parfaitement corrélé au rapport de l'épaisseur hydrodynamique et du rayon de courbure que ce soit en 2-D ou en 3-D.

Conclusions et perspectives

Les travaux menés dans cette thèse font partie d'un effort plus large de l'équipe de détonation au sein de l'Institut Pprime pour la compréhension fondamentale de la propagation des détonations non-idéales par le biais de simulations numériques à haute fidélité. Une prédiction numérique fiable de la structure cellulaire de la détonation et les limites d'extinction sont d'une importance capitale pour développer et concevoir des nouveaux dispositifs innovants pour la propulsion ainsi qu'à améliorer les protocoles de sécurité de procédés industriels.

Une première partie de ce travail de thèse a été de contribuer à l'amélioration d'un code de simulation numérique basé sur des schémas d'ordre élevés. Le code RESIDENT (*REcycling mesh SIMulation of DETonations*) développé par l'équipe, permet une résolution des équations d'Euler réactives. Les interpolations spatiales des variables caractéristiques s'appuient sur un schéma MP d'ordre 9. Les flux aux interfaces sont estimés en résolvant le problème de Riemann par le solveur HLLC et l'avancement en temps est assuré par un schéma Runge-Kutta d'ordre 3. Le développement numérique apporté a consisté en une optimisation du protocole MPI et du système d'écriture de fichiers I/O par un couplage à la librairie ADIOS (*ADaptable IO System*) pour une adaptation aux besoins requis des calculs à haute performance. Une méthode de calculs de moyennes conditionnées par la position de la surface du front de détonation a été mise en place afin d'obtenir des champs moyens de la détonation. L'équation d'état (EOS) de Noble-Abel a été implémentée dans l'optique de réaliser une comparaison avec l'équation d'état des gaz parfaits. Une adaptation du module EOS des gaz parfaits a permis de coupler le code de calcul à la librairie CHEMKIN afin d'utiliser des schémas cinétiques détaillés. Un mécanisme cinétique à trois étapes a été également implémenté et calibré pour les détonations à base d'hydrogène. Le passage d'un solveur HLLC vers un solveur hybride HLLC-M a permis de pallier à l'effet de carbuncle observé lorsque des chocs sont alignés avec le maillage. Une implémentation d'un maillage curviligne spéciale pour les détonation a été réalisée dans l'optique de réduire les coûts de calcul en 3-D futures.

Trois études ont été réalisées :

- Influence de l'équation d'état sur la structure cellulaire de la détonation gazeuse
- Influence de la cinétique chimique sur les détonations non-idéales
- Simulation des détonations multidimensionnelles

Le nombre d'heures de calculs utilisé pour mener à bien ces études était de ~ 10 millions (~ 6.5 millions sur le supercalculateur OCCIGEN du GENCI-CINES pour les études présentées dans le manuscrit et ~ 3.5 millions sur le MÉSOCENTRE DE CALCUL POITEVIN pour les calculs préliminaires)

Influence de l'équation d'état

La première étude a abordé la problématique de la propagation de la détonation 2-D dans les milieux réactifs initialement à haute pression. L'analyse bibliographique a indiqué que la vitesse de détonation est une fonction croissante de la pression initiale. Une comparaison de cette mesure de vitesse expérimentale avec les calculs théoriques qui s'appuient sur l'équation d'état des gaz parfaits ont révélé des écarts considérables. Une EOS mieux élaborée est alors nécessaire pour pallier cet écart. À partir de ces informations, nous avons mené une étude comparative de propagation de détonation dans un canal pour des trois pressions initiales élevées entre l'équation d'état des gaz parfaits et l'équation d'état Noble-Abel. Les paramètres cinétiques de la chimie à une étape globale et de la chaleur de réaction ont été maintenus identiques pour les deux EOS.

La structure cellulaire a révélé que l'équation Noble-Abel régularise les cellules à mesure que la pression initiale augmente tandis que l'équation d'état des gaz parfaits maintient une structure inchangée quel que soit la pression initiale. Puisque la régularité des structures cellulaires conditionne les règles empiriques de dimensionnement des applications industrielles, il était alors nécessaire de comprendre l'origine de cette différence de comportement.

Une analyse approfondie de l'évolution du front de détonation dans le cas d'équation d'état des gaz parfaits a révélé qu'une bifurcation s'opère sur le choc précurseur et se développe progressivement en un nouveau point triple. Ce phénomène contribue à la formation de nouvelles structures cellulaires. Ce mécanisme est moins récurrent dans la cas Noble-Abel permettant ainsi d'obtenir des structures plus régulières. Cette bifurcation provient d'une ligne de glissement attachées au choc qui subit le processus de formation suivant : (i) Une collision de points triples ; (ii) formation de jet qui interagit avec le disque de Mach pour former un point triple lors de la phase d'enrouement du jet ; (iii) diminution de l'intensité de ce dernier pour laisser place à une ligne de glissement attachée au front ; (iv) amplification de cette ligne par les allers-retours des ondes transverses et finalement formation à nouveau d'un point triple.

Les étapes (i) et (ii) étaient clairement identifiées dans la littérature et dépendaient

du rapport des capacités calorifiques. Or, dans le cas des gaz parfaits, ce coefficient et le coefficient isentropique se confondent. Dans notre cas, le coefficient isentropique est le mieux à même de décrire la compressibilité du milieu réactif. La régularisation des structures cellulaires avec la pression initiale est également traduite par l'augmentation du coefficient isentropique.

Influence de la modélisation chimique

La seconde étude s'est consacrée à l'influence de la modélisation chimique sur la structure cellulaire ainsi que les limites de propagation des détonations. En se basant sur trois modèles cinétiques de complexité croissante, le mélange $H_2 - O_2$ à la stoechiométrie a été étudié dans les conditions atmosphériques. Ces modèles sont ainsi confrontés dans des configurations 2-D de détonation idéale dans un canal et de détonation non-idéales dans un milieu semi-confiné par un gaz inerte.

Ces trois mécanismes cinétiques sont : un modèle à une étape globale, un modèle à trois étapes et une chimie détaillée. Les modèles simplifiés ont été calibrés sur les temps d'induction de la chimie détaillée pour une plage de températures. Malgré les similitudes constatées sur la dynamique du front de détonation dans le cas idéal, les structures cellulaires sont légèrement différentes entre les modèles réduits et la chimie détaillée. Les tailles de cellules sont inférieures aux tailles des modèles simplifiés ainsi que celles rencontrées expérimentalement.

Les hauteurs critiques obtenues lorsque la détonation subit des pertes latérales par le confinement inerte sont par ordre croissant $h_{c,détaillée} \ll h_{c,3-étapes} < h_{c,1-étape}$. La chimie détaillée nécessite une épaisseur réactive moindre que les autres modèles pour que la détonation se propage. Malgré le fait que le modèle chimique à trois étapes partage la même dynamique qu'avec la chimie détaillée ainsi que les mêmes temps d'induction, les hauteurs critiques diffèrent sensiblement par un facteur ~ 3.3 . Le modèle à une étape a une hauteur critique supérieure de 20% à celle de la chimie à trois étapes en dépit d'un temps d'induction inférieur allant jusqu'à deux ordres de grandeur à basses températures.

Une investigation par le critère de stabilité χ a révélé que la stabilité diminue avec la complexité du mécanisme $\chi_{détaillée} > \chi_{1-étapes} \gg \chi_{3-étape}$. Ce critère n'est alors pas suffisant pour expliquer les hauteurs critiques puisque le taux d'instabilité du modèle à trois étapes est très supérieur à celui de la chimie à une étape ; et légèrement inférieur à celui de la chimie détaillée. Ce résultat contraste avec les valeurs des hauteurs critiques. Une corrélation de la hauteur critique avec le maximum de thermicité $\dot{\sigma}_{max}$ est retrouvée

par le rapport $\dot{\sigma}_{\max}/\dot{\sigma}_{\max, \text{détailé}} \propto h_{\text{crit}}/h_{\text{crit}, \text{détailé}}$ pour les deux mécanismes simplifiés. Une possible amélioration des modèles simplifiés peut alors être obtenue en utilisant les profils de thermicité ainsi que les temps d'induction comme variables d'ajustement.

La hauteurs critiques observées dans le cas du mécanisme détaillé ($h_c \simeq 6$ mm) est en bon accord avec les expériences ($h_c \simeq 4$ mm). Ce constat plaide en faveur de la cinétique détaillée par rapport à la cinétique simplifiée.

Détonations multidimensionnelles

Le dernier volet de cette thèse met l'accent sur l'apport phénoménologique des détonations 3-D par rapport à celles 2-D qui sont souvent rencontrées dans la littérature. Le paramètre clé de cette étude est la sensibilité du mélange qui est contrôlée par l'énergie d'activation réduite $E_a/R_u T_0$. La configuration d'une détonation marginale d'un canal à section rectangulaire a été retenue. Puis dans un deuxième temps, une configuration d'une détonation confinée par un gaz inerte a été utilisée dans le cas d'un mélange moyennement stable ($E_a/R_u T_0 = 30$).

La confrontation des simulations 2-D aux simulations 3-D dans le canal marginal s'est basée sur d'abord, une analyse phénoménologique des champs instantanés, puis des profils moyens des variables thermodynamiques et cinétiques, et finalement des moyennes des fluctuations. Le mélange stable a révélé une dynamique instantanée supplémentaire issue de la troisième direction spatiale qui s'illustre à travers des modes appelés : mode diagonale et mode rectangulaire. Ces deux modes se distinguent par la présence d'une "slapping wave" dans la structure cellulaire du mode rectangulaire. Cet effet résulte d'un impact vertical d'une ligne de points triples sur la paroi comme le rapporte la littérature expérimentale et numérique. Pour les mélanges instables, ces modes sont plus difficiles à distinguer et une structure cellulaire irrégulière est observée. La structure tourbillonnaire issue du front de détonation a été analysée au travers de l'équation de vorticit . Des diff rences significatives entre les simulations 2-D et 3-D ont  t  constat es. La pr sence d'une contribution suppl mentaire dans les termes sources issus de la d formation du tube de vorticit  impacte le comportement du terme li  aux effet baroclines ; effets qui se conservent en 2-D tandis qu'il d cro t en 3-D jusqu'  devenir du m me ordre de grandeur que l'estimation du terme diffusif. L'amplitude des termes en 2-D sont d'un ordre de grandeur sup rieur   ceux en 3-D. Cela s'explique par la pr sence d'un nombre plus important d'ondes de choc transverses et de lignes de points triples (pr sence de la "slapping wave") en 3-D.

Les études consacrées aux effets 3-D dans la littérature se sont limitées à des interprétations qualitatives des champs instantanés de détonation. Ce constat a motivé l'analyse de la détonation à travers la structure moyenne. Des moyennes conditionnées sur la position instantanée de la surface du choc ont été alors réalisées. Malgré les différences observées sur la structure instantanée, les profils moyens des grandeurs thermodynamiques et les fractions massiques ne montrent que peu de différence entre les simulations 2-D et 3-D. Les profils sont quasi-autosimilaires lorsque ces quantités sont présentées en fonction de la fraction massique. Seule la distribution spatiale semble être affectée par l'énergie d'activation réduite. L'épaisseur hydrodynamique, présentée comme la distance moyenne au plan sonique augmente avec l'énergie d'activation, varie comme $h_t/l_{1/2} \sim (E_a/R_u T_0)^\alpha$, où $\alpha = 0.7$ en 2-D et $\alpha = 0.46$ en 3-D. Le taux de dégagement de chaleur est autosimilaire sur la demi-longueur de réaction $l_{1/2}$ lorsque la fraction massique évolue jusqu'à $1/2$; puis redevient quasi-autosimilaire sur une distance de 5 à 15 $(l_{1/2} \times E_a/R_u T_0)^\alpha$, $\alpha = 0.46$ lorsque la fraction massique chute vers $1/10$. L'auto-similarité est aussi retrouvée pour la masse volumique, la température et la fraction massique sur une distance de demi-longueur de réaction $l_{1/2}$. Lorsque le nombre de Mach s'approche de l'unité, en dépassant la valeur de $1/\sqrt{\gamma}$, l'épaisseur hydrodynamique semble être une bonne candidate pour adimensionner les résultats ($x/h_t \simeq 0.4-1$ et $\tilde{Y} < 5.10^{-2}$), notamment pour la masse volumique et la fraction massique. L'épaisseur hydrodynamique apparaît ainsi comme une échelle externe ("outer scale").

Nous avons par la suite proposé une analyse de énergie totale des fluctuations à travers l'énergie de Chu. Ce modèle contient l'énergie cinétique turbulente, l'énergie potentielle liée aux fluctuations de pression et l'énergie des fluctuations d'entropie. L'analyse a révélé que les fluctuations de température constituent la plus importante contribution aux fluctuations d'entropie et elles sont directement proportionnelles aux fluctuations de fraction massique. Ces fluctuations sont ainsi liées au taux de dégagement de chaleur proche du choc. Le pic des fluctuations peut être adimensionnalisé par l'énergie d'activation réduite $E_a/R_u T_0$ et peut atteindre 10% de la chaleur de réaction dans la zone du maximum de dégagement de chaleur. Cette quantité subit une chute à cause de la décroissance des fluctuations d'entropie à mesure que l'on s'éloigne de cette zone. Un équilibre entre l'énergie cinétique turbulente et l'énergie potentielle se produit alors à mesure qu'on s'éloigne de la zone du dégagement de chaleur. L'analyse des corrélations entre les fluctuations de la température et la masse volumique a révélé que dans la zone du dégagement de chaleur, ces fluctuations sont anti-corrélées, signe d'un comportement isobare. En s'éloignant de celle-ci, une relaxation est observée, vers un comportement quasi-isentropique au voisinage du plan sonique. Loin de la zone du dégagement de chaleur, ce sont les fluctuations de pression et de masse volumique qui sont parfaitement corrélées.

L'analyse de la micro-échelle de Taylor longitudinale a montré que celle-ci atteint une valeur stationnaire rapidement derrière le choc. Cette valeur limite diminue allant de $3/2 l_{1/2}$ pour un mélange stable jusqu'à $1/2 l_{1/2}$ pour un mélange instable. Les échelles transverses sont plus élevées que l'échelle longitudinale à cause des ondes transverses. Les fluctuations moyennes de vitesse sont totalement décorréliées. L'analyse de l'anisotropie du tenseur de Reynolds via le diagramme de Lumley montre que les fluctuations des vitesses sont isotropes.

La deuxième partie de cette étude a été consacrée aux détonations semi-confinées par un gaz inerte. Des structures instantanées ainsi que des champs moyens ont été comparées pour un mélange régulier $E_a/R_u T_0 = 20$ et un mélange faiblement irrégulier $E_a/R_u T_0 = 30$ dans le cas 2-D. Le rayon de courbure du front (engendré par les pertes latérales) est d'autant plus importants que la détonation devient instable. La hauteur réactive nécessaire à entretenir la propagation est par conséquent plus important pour le mélange irrégulier. Des comparaisons entre les simulations 2-D et 3-D ont été réalisées pour le mélange faiblement irrégulier. Elles montrent que, pour la même hauteur réactive, le déficit de vitesse de détonation est moins important en 3-D. Une base de donnée initiée dans des travaux précédents de l'équipe a été étendue par ces points de fonctionnement. L'analyse de cette base a révélé que le déficit de vitesse est parfaitement corrélé au rapport de l'épaisseur hydrodynamique sur le rayon de courbure que ce soit en 2-D ou en 3-D.

Perspectives

Les études réalisées lors de cette thèse ouvrent de nombreuses perspectives. L'étude des détonations dans les milieux à haute pression initiale a ainsi permis de mettre en évidence l'influence de l'équation d'état dans la modélisation de la détonation. Une régularisation de la structure cellulaire a été observée. Il serait alors intéressant de regarder l'influence conjuguée de l'énergie d'activation réduite et du coefficient isentropique sur les limites d'extinction de la détonation.

Concernant la modélisation chimique, une amélioration des modèles simplifiés est nécessaire au regard du coup de calcul observé en chimie détaillée. Ce constat est d'autant plus important pour les mélanges réactifs composés d'hydrocarbures où les schémas cinétiques mettent en jeu des centaines de réactions et d'espèces chimiques. Ainsi, l'amélioration du modèle à trois étapes est nécessaire, afin d'inclure la variation de la masse molaire et le rapport des capacités calorifiques γ . En outre, l'extension de la cinétique simplifiée pour inclure une compétition entre les radicaux permettra d'améliorer les capacités prédictives du modèles. Des méthodes de tabulation de la chimie détaillée basée sur des critères de

détonation tels que la thermicité permettrait également d'améliorer la capacité prédictive. Également, des méthodes de tabulation de la chimie détaillée seraient des candidats potentiels.

En ce qui concerne les simulations numériques 3-D, l'emploi des équations de Navier-Stokes à la place des équations d'Euler permettra d'obtenir une meilleure description des mélanges très irréguliers. En effet, ces effets dissipatifs sont potentiellement non-négligeables dans la consommation des gaz imbrûlés. Une base de données DNS, bien que très coûteuse semble également cruciale pour renseigner des modèles LES ou CLEM (*Compressible Linear Eddy Modelling*) pour la détonation. L'application d'outils d'analyse de la turbulence compressibles accompagnés de ceux de la combustion turbulente s'avère importante à la compréhension des détonations.

Schéma numérique dans le cas d'un maillage curviligne spécifique

A.1 Bilan sur les équations de conservation

Les vecteurs (e_n, e_τ) associés à un côté d'une maille de calcul sont

$$e_n = \sin \theta \vec{i} - \cos \theta \vec{j} \quad (\text{A.1})$$

$$e_\tau = \cos \theta \vec{i} + \sin \theta \vec{j} \quad (\text{A.2})$$

Bilan de conservation de la masse

Les bilans de masse, de quantité de mouvement et d'énergie sont effectués sur un volume de contrôle discret afin de construire une formulation discrète dans le cas d'un maillage curviligne spécifique.

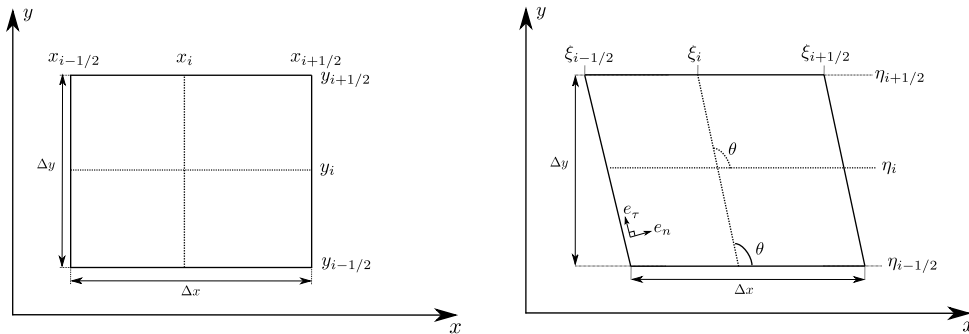


FIGURE A.1 – Nouvelles coordonnées dans lequel pour le passage de maillage cartésien en curviligne adapté à un front de détonation courbe.

$$|\Omega| \frac{\partial}{\partial t} (\rho \vec{u}) + \int_{\partial\Omega} \rho (\vec{u} \cdot \vec{n}) d\sigma = 0 \quad (\text{A.3})$$

Pour des raisons de clarté, les expressions seront présentées avec leur forme 2-D. Le bilan de masse est effectué sur le volume de contrôle $\Omega = [\xi_{i-1/2}, \xi_{i+1/2}] \times [\eta_{i-1/2}, \eta_{i+1/2}]$ avec un maillage uniforme.

$$\begin{aligned} \Delta x \Delta y \frac{\partial \rho}{\partial t} + \Delta x [(\rho v)(\xi_i, \eta_{i+1/2}) - (\rho v)(\xi_i, \eta_{i-1/2})] \\ + \frac{\Delta y}{\sin \theta} [(\rho u_n)(\xi_{i+1/2}, \eta_i) - (\rho u_n)(\xi_{i-1/2}, \eta_i)] = 0 \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

Après quelques réarrangements et différentiation, l'équation précédente s'écrit

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\Delta x}{\Delta x \Delta y} \Delta \eta \frac{\partial(\rho v)}{\partial \eta} + \frac{\Delta y / \sin \theta}{\Delta x \Delta y} \Delta \xi \frac{\partial(\rho u_n)}{\partial \xi} = 0 \quad (\text{A.5})$$

Avec

$$u_n = \vec{u} \cdot \vec{e}_n, \text{ i.e. normale à la face } \vec{e}_n = \sin \theta \vec{i} + (-\cos \theta) \vec{j} \quad (\text{A.6})$$

soit

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial(\rho u_n)}{\partial \xi} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial \eta} = 0 \quad (\text{A.7})$$

or

$$\begin{aligned} \rho u_n / \sin \theta &= \rho(u \sin \theta - v \cos \theta) / \sin \theta \\ &= \rho(u - v/a) \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

avec $a = \tan \theta$ Finalement l'équation de conservation de masse en 3-D s'étend sous la forme suivante

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho(u - v/a)}{\partial \xi} + \frac{\partial \rho(v)}{\partial \eta} + \frac{\partial \rho(w)}{\partial \zeta} = 0 \quad (\text{A.9})$$

Bilan de conservation de la quantité de mouvement

Le bilan de quantité de mouvement sur un volume de contrôle Ω - de surface $\partial\Omega$ peut s'écrire de la façon suivante, \vec{n} étant la normale sortante

$$|\Omega| \frac{\partial}{\partial t} (\rho \vec{u}) + \int_{\partial\Omega} \rho \vec{u} (\vec{u} \cdot \vec{n}) d\sigma + \int_{\partial\Omega} p \vec{n} d\sigma = 0 \quad (\text{A.10})$$

On effectue maintenant un bilan de quantité de mouvement en 2-D sur le volume de contrôle $[\xi_{i-1/2}, \xi_{i+1/2}] \times [\eta_{i-1/2}, \eta_{i+1/2}]$ de la même manière que précédemment

$$\Delta x \Delta y \frac{\partial \rho \vec{u}}{\partial t} + \Delta x [(\rho \vec{u} v + p \vec{e}_y)(\xi_i, \eta_{i+1/2}) - (\rho \vec{u} v + p \vec{e}_y)(\xi_i, \eta_{i-1/2})] \quad (\text{A.11})$$

$$+ \frac{\Delta y}{\sin \theta} [(\rho \vec{u} u_n + p \vec{e}_n)(\xi_{i+1/2}, \eta_i) - (\rho \vec{u} u_n + p \vec{e}_n)(\xi_{i-1/2}, \eta_i)] = 0 \quad (\text{A.12})$$

d'où

$$\frac{\partial(\rho \vec{u})}{\partial t} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \xi} (\rho u_n \vec{u} + p \vec{e}_n) + \frac{\partial}{\partial \eta} (\rho \vec{u} v + p \vec{e}_y) = 0 \quad (\text{A.13})$$

On a également le vecteur de flux de quantité de mouvement au travers de chaque face

$$(\rho u_n^2 + p) \vec{e}_n + \rho u_n v_n \vec{e}_n^\perp \quad (\text{A.14})$$

tel que

$$\begin{cases} u_n = \vec{u} \cdot \vec{e}_n = u \sin \theta - v \cos \theta \\ v_n = \vec{u} \cdot \vec{e}_n^\perp = u \cos \theta + v \sin \theta \end{cases} \quad (\text{A.15})$$

$$\begin{aligned} (\rho u_n^2 + p) \vec{e}_n + \rho u_n v_n \vec{e}_n^\perp &= \begin{cases} (\rho u_n^2 + p) \sin \theta \vec{e}_x - (\rho u_n^2 + p) \cos \theta \vec{e}_y \\ + \rho u_n v_n \cos \theta \vec{e}_x + \rho u_n v_n \sin \theta \vec{e}_y \end{cases} \quad (\text{A.16}) \\ &= \begin{cases} [\rho u_n (u_n \sin \theta + v_n \cos \theta) + p \sin \theta] \vec{e}_x \\ + [\rho u_n (-u_n \cos \theta + v_n \sin \theta) - p \cos \theta] \vec{e}_y \end{cases} \end{aligned}$$

En remplaçant les expressions de u_n et v_n dans l'équation précédente, on obtient :

$$\begin{aligned} &= \begin{cases} [\rho u_n ((u \sin \theta - v \cos \theta) \sin \theta + (u \cos \theta + v \sin \theta) \cos \theta) + p \sin \theta] \vec{e}_x \\ + [\rho u_n (-(u \sin \theta - v \cos \theta) \cos \theta + (u \cos \theta + v \sin \theta) \sin \theta) - p \cos \theta] \vec{e}_y \end{cases} \\ &= \begin{cases} [\rho u_n u (\sin^2 \theta + \sin^2 \theta) + p \sin \theta] \vec{e}_x \\ + [\rho u_n v (\sin^2 \theta + \sin^2 \theta) - p \cos \theta] \vec{e}_y \end{cases} = \begin{cases} [\rho u_n u + p \sin \theta] \vec{e}_x \\ + [\rho u_n v - p \cos \theta] \vec{e}_y \end{cases} \\ &= \begin{cases} [\rho (u \sin \theta - v \cos \theta) u + p \sin \theta] \vec{e}_x \\ + [\rho (u \sin \theta - v \cos \theta) v - p \cos \theta] \vec{e}_y \end{cases} = \frac{1}{\sin \theta} \begin{cases} [\rho (u - v/a) u + p] \vec{e}_x \\ + [\rho (u - v/a) v - p/a] \vec{e}_y \end{cases} \end{aligned}$$

Finalement l'expression des équations de conservation de la quantité de mouvement s'écrit

en 3-D

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial \rho u(u - v/a) + p}{\partial \xi} + \frac{\partial \rho uv}{\partial \eta} + \frac{\partial uw}{\partial \zeta} = 0 \quad (\text{A.17})$$

$$\frac{\partial \rho v}{\partial t} + \frac{\partial \rho v(u - v/a) - p/a}{\partial \xi} + \frac{\partial \rho v^2 + p}{\partial \eta} + \frac{\partial \rho vw}{\partial \zeta} = 0 \quad (\text{A.18})$$

$$\frac{\partial \rho w}{\partial t} + \frac{\partial \rho w(u - v/a)}{\partial \xi} + \frac{\partial \rho vw}{\partial \eta} + \frac{\partial \rho w^2}{\partial \zeta} = 0 \quad (\text{A.19})$$

avec $a = \tan \theta$.

Bilan de conservation de l'énergie totale

$$|\Omega| \frac{\partial}{\partial t} \rho E + \int_{\partial\Omega} \rho E (\vec{u} \cdot \vec{n}) d\sigma + \int_{\partial\Omega} p (\vec{u} \cdot \vec{n}) d\sigma = 0 \quad (\text{A.20})$$

De la même manière que pour l'équation de conservation de masse, le bilan sur le volume de contrôle Ω permet d'avoir l'expression de l'énergie totale dans le repaire curviligne.

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial (\rho E + p)(u - v/a)}{\partial \xi} + \frac{\partial (\rho E + p)v}{\partial \eta} + \frac{\partial (\rho E + p)w}{\partial \zeta} = 0 \quad (\text{A.21})$$

Bilan de conservation des espèces réactives

$$|\Omega| \frac{\partial}{\partial t} \rho Y_i + \int_{\partial\Omega} \rho Y_i (\vec{u} \cdot \vec{n}) d\sigma = |\Omega| \dot{\omega}_i \quad (\text{A.22})$$

De la même manière que pour l'équation de conservation de masse, le bilan sur le volume de contrôle Ω permet d'avoir l'expression de l'énergie totale dans le repaire curviligne.

$$\frac{\partial \rho Y_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho Y_i (u - v/a)}{\partial \xi} + \frac{\partial \rho Y_i v}{\partial \eta} + \frac{\partial \rho Y_i w}{\partial \zeta} = \dot{\omega}_i \quad (\text{A.23})$$

En regroupant des équation de conservation A.9, A.17, A.21, A.23 sous forme compacte, on obtient le système d'équations hyperbolique suivante

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial (F(U) - G(U)/a)}{\partial \xi} + \frac{\partial G(U)}{\partial \eta} + \frac{\partial H(U)}{\partial \zeta} = 0 \quad (\text{A.24})$$

avec $a = \tan \theta$ et U, F, G, H étant

$$U = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho w \\ \rho E \\ \rho Y \end{bmatrix}, F = \begin{bmatrix} \rho(u - v/a) \\ \rho u(u - v/a) + p \\ \rho v(u - v/a) - p/a \\ \rho u w(u - v/a) \\ (\rho E + p)(u - v/a) \\ \rho Y(u - v/a) \end{bmatrix}, G = \begin{bmatrix} \rho v \\ \rho u v \\ \rho v^2 + p \\ \rho v w \\ (\rho E + p)v \\ \rho Y v \end{bmatrix}, H = \begin{bmatrix} \rho w \\ \rho u w \\ \rho v w \\ \rho w^2 + p \\ (\rho E + p)w \\ \rho Y w \end{bmatrix}$$

La même stratégie de splitting d'opérateurs que dans le cas cartésien peut être alors effectuée. Les seules modifications sont celles associées au vecteur vitesse pour l'estimation du flux par le solveur HLLC et celle apportée par le facteur $1/\sin \theta$ dans l'écriture du schéma numérique dans la direction ξ .

A.2 Initialisation du maillage curviligne

Lorsqu'une détonation est soumise à des pertes latérales, des expansions occasionnent une courbure du front. Cette courbure a un angle maximal au niveau de l'interface où les pertes s'opèrent et un angle minimal au niveau de la paroi rigide. L'observation du front montre alors un angle allant de $\theta = 90^\circ$ au niveau de la paroi jusqu'à $\theta \simeq 130^\circ$ à l'interface par rapport à l'axe de propagation comme l'atteste la figure A.2. Un maillage s'adaptant à cette configuration est ainsi mis en place dans cette section. Soit y définie comme variable spatiale dépendante de x et d'un rayon de courbure R . La relation entre les trois variables est décrite comme suit :

$$(x - x_0)^2 + y^2 = R \quad (\text{A.25})$$

Avec x_0 étant l'origine de la courbure. L'angle θ est alors introduit de la manière suivante :

$$\tan \theta = \frac{y}{x - x_0} \quad (\text{A.26})$$

En dérivant l'équation précédente :

$$(1 + \tan^2 \theta) \frac{d\theta}{dy} = \frac{x - x_0 - y(x - x_0)'}{(x - x_0)^2} \quad (\text{A.27})$$

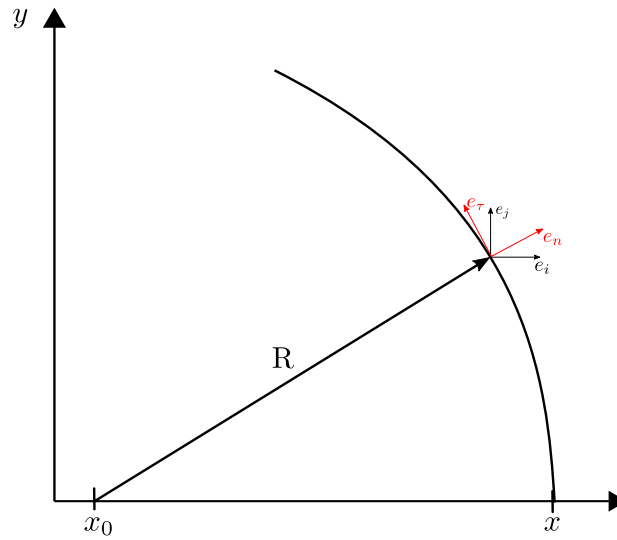


FIGURE A.2 – Schéma représentant une initialisation du domaine avec un angle θ variable en fonction de la hauteur suivant y

avec

$$x - x_0 = \sqrt{R^2 - y^2} \quad (\text{A.28})$$

Soit la dérivée de l'équation précédente

$$(x - x_0)' = \frac{-2y}{2\sqrt{R^2 - y^2}} = \frac{-y}{\sqrt{R^2 - y^2}} \quad (\text{A.29})$$

Où

$$(x - x_0)' = \frac{-y}{x - x_0} \quad (\text{A.30})$$

En remplaçant la dérivée dans A.27

$$\left[1 + \frac{y^2}{(x - x_0)^2} \right] \frac{d\theta}{dy} = \frac{x - x_0 + y^2/(x - x_0)}{(x - x_0)^2} \quad (\text{A.31})$$

L'expression de la dérivée de θ

$$\frac{d\theta}{dy} = \frac{(x - x_0)^2}{y^2 + (x - x_0)^2} \cdot \frac{x - x_0 + y^2/(x - x_0)}{(x - x_0)^2} \quad (\text{A.32})$$

Soit en exprimant le rayon de courbure

$$\frac{d\theta}{dy} = \frac{1}{R^2} \left(x - x_0 + \frac{y^2}{x - x_0} \right) \quad (\text{A.33})$$

Après quelques transformations

$$\frac{d\theta}{dy} = \frac{1}{x - x_0} = \frac{d\theta}{dy} = \frac{1}{\sqrt{R^2 - y^2}} = \frac{1}{R} \frac{1}{\sqrt{1 - (y/R)^2}} = \frac{d}{dy} [\arcsin(y/R)] \quad (\text{A.34})$$

soit en intégrant cette équation sur un domaine $[0, \theta]$

$$\theta - \theta(y = 0) = \arcsin(y/R) - \arcsin(0) \quad (\text{A.35})$$

On obtient finalement l'expression de l'angle θ , fonction variable de y et du rayon de courbure R s'exprimant comme suit

$$\theta = \pi/2 + \arcsin(y/R) \quad (\text{A.36})$$

Algorithmes de post-traitement

La position moyenne du choc permet de récupérer la courbure moyenne de la détonation. Cette information est utilisée par la suite pour calculer le rayon de courbure et quantifier les pertes engendrée par l'expansion latérale des produits et qui se manifestent par le déficit de vitesse. L'algorithme permettant de calculer cette moyenne est présenté dans la Table B.1.

TABLE B.1 – Algorithme de calcul de la position moyenne du choc (x_s)

Début
Pour $j = 1$ jusqu'à N_y
Pour $k = 1$ jusqu'à N_z
$i_s \leftarrow 0$
Pour $i = N_x$ jusqu'à 1
Si $\Delta p / \Delta x \gg \epsilon$
$i_s \leftarrow i$
Arrêt Pour
Fin Si
Fin Pour
$\bar{x}_s^{n+1}(j, k) \leftarrow \bar{x}^n(j, k) + [x^{n+1}(i_s, j, k) - \bar{x}^n(j, k)](\Delta t^{n+1}/t^{n+1})$
Fin Pour k
Fin Pour j
<hr/>
Sortie
Si écriture == vrai
Si Processus == présence du choc
écrire \bar{x}_s, x_s
Fin Si
Fin Si
<hr/>
Fin
<hr/>

La procédure de calcul des moyennes est conditionnée par la connaissance de la position instantanée du choc. Un algorithme illustratif de l'implémentation de cette méthode est présenté dans la table B.2.

TABLE B.2 – Algorithme de calcul des moyennes conditionnées par la position du choc

Début Pour $j = 1$ jusqu'à N_y Pour $k = 1$ jusqu'à N_z $i_s \leftarrow 0$ Pour $i = N_x$ jusqu'à 1 Si $\Delta p / \Delta x \gg \epsilon$ $i_s \leftarrow i$ Arrêt Pour i Fin Si Fin Pour i Communication $x_s^{n+1}(j, k)$ entre processus suivant la direction x $n_s(j, k) \leftarrow \text{round}([x_s^{n+1}(j, k) - x_s^n(j, k)] / \Delta x)$ $\phi^n(1 : N_x, j, k) \leftarrow \text{shift}(\phi^n(1 : N_x, j, k), \text{direction} \leftarrow x, \text{pas} \leftarrow n_s)$ Pour $i = 1$ jusqu'à N_x $\bar{\phi}^{n+1}(i, j, k) \leftarrow \bar{\phi}^n(i, j, k) + [\phi^{n+1}(i, j, k) - \bar{\phi}^n(i, j, k)](\Delta t^{n+1} / t^{n+1})$ Fin Pour i Fin Pour k Fin Pour j
<hr/> Sortie Si écriture == vrai Pour $j = 1$ jusqu'à N_y Pour $k = 1$ jusqu'à N_z $n_s(j, k) \leftarrow \text{round}([\bar{x}_s^{n+1}(j, k) - x_s^{n+1}(j, k)] / \Delta x)$ $\phi^n(1 : N_x, j, k) \leftarrow \text{shift}(\phi^n(1 : N_x, j, k), \text{direction} \leftarrow x, \text{pas} \leftarrow n_s)$ Fin Pour k Fin Pour j écrire ϕ Fin Si

Relations CJ et vN pour l'équation d'état Noble-Abel

Les relations de saut pour un choc droit, de Chapman-Jouguet, exactes comme approchées sont dérivées dans le cas d'une équation d'état Noble-Abel [135, 303]. Le rapport des capacités calorifiques γ est considéré constant.

C.1 État von Nemann

C.1.1 Relations approchées

Les relations de saut d'un choc droit sont dérivées à partir des équations de conservation. Il convient en premier lieu de rappeler l'expression de l'enthalpie dans l'hypothèse d'une équation d'état Noble-Abel

$$h = e + pv = c_v T + pv \quad (\text{C.1})$$

avec $c_v = r/(\gamma - 1)$. L'expression de l'enthalpie en fonction de la pression et la masse volumique permet de nous renseigner sur le changement de variables nécessaire pour faciliter la dérivation

$$h = \frac{\gamma P}{(\gamma - 1)\rho} \left(1 - \frac{b\rho}{\gamma}\right) \quad (\text{C.2})$$

On pose alors ξ et η les nouvelles variables tel que $\xi = (1 - b\rho/\gamma)$ et $\eta = 1 - b\rho$. l'Équation C.2 devient

$$h = \frac{\gamma P}{(\gamma - 1)\rho} \xi \quad (\text{C.3})$$

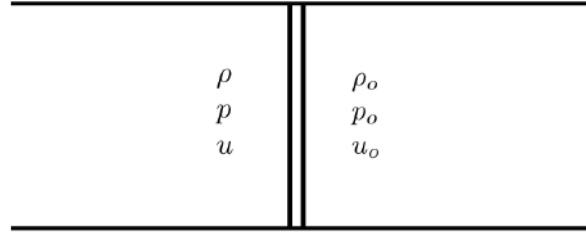


FIGURE C.1 – Représentation schématique d'un choc droit.

Les équations de conservation de masse, quantité de mouvement et d'énergie sont exprimées dans le repère liées au choc (voir Figure C.1).

$$\text{Masse : } \rho u = \rho_o u_o \quad (\text{C.4})$$

$$\text{Quantité de mouvement : } p + \rho u = p_o + \rho_o u_o \quad (\text{C.5})$$

$$\text{Énergie totale : } h + \frac{1}{2}u^2 = h_o + \frac{1}{2}u_o^2 \quad (\text{C.6})$$

La vitesse de l'écoulement en amont du choc s'écrit en fonction du nombre de Mach amont M_o de la manière suivante

$$u_o^2 = M_o^2 c^2 = \frac{M_o^2 \gamma p_o}{\rho_o \eta_o} \quad (\text{C.7})$$

L'équation de conservation de la masse ainsi que l'équation de conservation de la quantité de mouvement C.7 permettent d'exprimer la pression post-choc

$$p - p_o = \frac{1}{\rho_o} \left(\frac{\rho_o}{\rho} - 1 \right) (\rho_o u_o)^2 \quad (\text{C.8})$$

On posant θ une nouvelle variable tel que $\theta = \rho/\rho_o$ et en remplaçant u_o en utilisant l'équation C.7, le rapport de saut de pression devient

$$\frac{p}{p_o} = 1 + \left(1 - \frac{1}{\theta} \right) \frac{\gamma M_o^2}{\eta_o} \quad (\text{C.9})$$

En remplaçant l'équation de conservation de la masse dans celle de l'énergie, on obtient l'égalité suivante

$$\frac{p}{\rho} \frac{\gamma}{\gamma - 1} \xi + \frac{1}{2} \left(\frac{\rho_o}{\rho} \right)^2 u_o^2 = \frac{p_o}{\rho_o} \frac{\gamma}{\gamma - 1} \xi_o + \frac{1}{2} u_o^2 \quad (\text{C.10})$$

Après réarrangement, le rapport de pression issu de la combinaison des équations de masse et d'énergie devient

$$\frac{p}{p_o} = \theta \frac{\xi_o}{\xi} + \frac{\theta}{2} \left(1 - \frac{1}{\theta^2} \right) \frac{(\gamma - 1) M_o^2}{\eta_o \xi} \quad (\text{C.11})$$

Afin de retrouver le saut de pression à travers le choc droit pour une approximation d'un choc fort $M_o \gg 1$, l'égalité entre les deux sauts de pression issus respectivement de la combinaison masse/quantité de mouvement C.9 et masse/énergie C.11 donne

$$\frac{p}{p_o} = \left(1 - \frac{1}{\theta}\right) \frac{\gamma M_o^2}{\eta_o} \quad (\text{C.12a})$$

$$\frac{p}{p_o} = \frac{\theta}{2} \left(1 - \frac{1}{\theta^2}\right) \frac{(\gamma - 1) M_o^2}{\eta_o \xi} \quad (\text{C.12b})$$

Finalement, on obtient l'équation suivante

$$2\gamma\xi = (\theta + 1)(\gamma - 1) \quad (\text{C.13})$$

En enlevant le changement de variables, le saut de densité à travers un choc fort s'écrit

$$\frac{\rho}{\rho_o} = \frac{\gamma + 1}{\gamma - 1 + 2b\rho_o} \quad (\text{C.14})$$

Le saut de vitesse s'obtient à travers la conservation de la masse

$$\frac{u}{u_o} = \frac{\gamma - 1 + 2b\rho_o}{\gamma + 1} \quad (\text{C.15})$$

Le saut de pression se déduit en remplaçant le rapport de densité C.14 dans l'équation C.12a. Il vient alors

$$\frac{p}{p_o} = \left(1 - \frac{\gamma - 1 + 2b\rho_o}{\gamma + 1}\right) \frac{\gamma M_o^2}{\eta_o} \quad (\text{C.16})$$

Après réarrangement et simplification mathématique on obtient finalement

$$\frac{p}{p_o} = \frac{2\gamma}{\gamma + 1} M_o^2 \quad (\text{C.17})$$

Le saut de température est retrouvé à l'aide de l'équation d'état

$$\frac{T}{T_o} = \frac{2\gamma M_o^2 (\gamma - 1)}{(\gamma + 1)^2} \quad (\text{C.18})$$

C.1.2 Relations exactes

La solution exacte est dérivée des équations de conservation énoncées précédemment. En remplaçant l'expression de l'enthalpie dans l'équation d'énergie on obtient un système de trois équations avec trois inconnues à résoudre. Ces équations sont réécrites de la

manière suivante

$$\rho_o u_o^2 - \rho u = 0 \quad (\text{C.19a})$$

$$\rho_o u_o^2 - \rho u^2 + p_o - p = 0 \quad (\text{C.19b})$$

$$\frac{p_o}{\rho_o} \left[\frac{\gamma - b\rho_o}{\gamma - 1} \right] - \frac{p}{\rho} \left[\frac{\gamma - b\rho}{\gamma - 1} \right] + \frac{u_o^2 - u^2}{2} = 0 \quad (\text{C.19c})$$

Ces équations précédentes sont résolues en utilisant la librairie Sympy de langage de programmation Python pour les inconnues ρ, p et u . Les expressions finales s'écrivent comme suit

$$\rho = \frac{\rho_o^2 u_o^2 (\gamma + 1)}{2u_o^2 b \rho_o^2 + D^2 \gamma \rho_o - u_o^2 \rho_o + 2\gamma p_o} \quad (\text{C.20})$$

$$p = \frac{2\rho_o u_o^2 - 2\rho_o u_o^2 b - \gamma p_o + p_o}{(\gamma + 1)} \quad (\text{C.21})$$

$$u = \frac{2(\rho_o u_o^2 - \rho_o^2 u_o^2 b - \gamma p_o)}{\rho_o u_o (\gamma + 1)} \quad (\text{C.22})$$

À partir des expressions précédentes, les relations de saut exactes à partir des résultats précédents et en fonction du nombre de Mach amont on obtient

$$\frac{\rho}{\rho_o} = \frac{M_o^2 (\gamma + 1)}{M_o^2 (\gamma + 1) - 2(1 - b\rho_o)(M_o^2 - 1)} \quad (\text{C.23})$$

$$\frac{u}{u_o} = 1 - \frac{2(1 - b\rho_o)(M_o^2 - 1)}{(\gamma + 1)M_o^2} \quad (\text{C.24})$$

$$\frac{T}{T_o} = 1 + \frac{2(M_o^2 - 1)(\gamma M_o^2 + 1)(\gamma - 1)}{M_o^2 (\gamma + 1)^2} \quad (\text{C.25})$$

C.2 Théorie CJ

L'énergie interne est rappelée

$$e = \frac{p(v - b)}{\gamma - 1} \quad (\text{C.26})$$

b est le co-volume et γ est coefficient polytropique et v le volume massique. La vitesse du son est dérivée suivant la relation suivante

$$c^2 = \frac{\frac{p}{\rho^2} - \frac{\partial e}{\partial \rho} \Big|_p}{\frac{\partial e}{\partial p} \Big|_\rho} \quad (\text{C.27})$$

Après développement, on obtient

$$c^2 = \frac{\gamma p}{\rho(1 - b\rho)} \quad (\text{C.28})$$

Lorsque le milieu initial est au repos, les relations de Rankine-Hugoniot sont C.1

$$m^2 = \rho_0 D = \rho(D - u) \quad (\text{C.29})$$

$$p = p_0 - (\rho_0 D)^2 (v - v_0) \quad (\text{C.30})$$

$$e = e_0 - \frac{p + p_0}{2} (v - v_0) \quad (\text{C.31})$$

Pour une détonation à l'état CJ, la vitesse de détonation est définie $D = u + c$. Ainsi, l'équation C.29 devient

$$m^2 = \rho_0 D = \rho(D - u) = \rho c \quad (\text{C.32})$$

C.2.1 Relations approchées

En utilisation l'approximation d'un choc fort $p/p_0 \gg 1$ and $e/e_0 \gg 1$, les équations C.29 and C.30 deviennent

$$m^2 = \gamma p \rho / (1 - b\rho) \quad (\text{C.33})$$

$$p \approx \gamma p \rho / (1 - b\rho) (v - v_0) \quad (\text{C.34})$$

Ainsi, la droite de Rayleigh donnée par l'équation C.30 devient

$$\frac{v}{v_0} = \frac{\gamma + b\rho_0}{\gamma + 1} \quad (\text{C.35})$$

ou encore

$$\frac{v - b}{v_0 - b} = \frac{\gamma}{\gamma + 1} \quad (\text{C.36})$$

De l'équation C.31, on obtient

$$\frac{p(v - b)}{\gamma - 1} = q - \frac{p}{2}(v - v_0) \quad (\text{C.37})$$

La pression est ainsi obtenue après réarrangement

$$p = 2(\gamma - 1)\rho_0 q(1 - b\rho_0)^{-1} \quad (\text{C.38})$$

Les effets de gaz réel se manifestent à travers une augmentation de la pression à l'état CJ pour un dégagement d'énergie équivalent au cas de gaz parfait. En outre, cette pression se retrouve aussi en fonction de la vitesse de la détonation à travers l'équation de conservation de la masse C.29,

$$\rho_0 D = \rho(D - u) = \rho c \quad (\text{C.39})$$

ou encore en remplaçant la vitesse du son par son expression C.28

$$(\rho_0 D)^2 = (\rho c)^2 = \gamma p \rho (1 - b\rho)^{-1} \quad (\text{C.40})$$

Finalement,

$$p = \frac{\rho_0 D^2}{\gamma + 1} (1 - b\rho_0) \quad (\text{C.41})$$

La vitesse de détonation est retrouvée à travers l'égalité entre les équations C.38 et C.41

$$D^2 = 2(\gamma^2 - 1)q / (1 - b\rho_0)^2 \quad (\text{C.42})$$

Les effets de gaz réel réduisent la pression à l'état CJ et augmentent la vitesse D . Il est à noter que ces relations précédentes s'écartent des relations de gaz parfait par un facteur $1 - b\rho_0$ (voir Fickett & Davis [9], Appendix 2A, p. 54.)

C.2.2 Relations exactes de CJ

La section précédente indique que le changement de variables nécessaires pour dériver la solution exacte est $y = p/p_0$ and $x = (v - b)/(v_0 - b)$. On introduit les deux variables réduites suivantes : $q' = \frac{2q}{p_0(v_0 - b)}$ et $k = \frac{\gamma + 1}{\gamma - 1}$. D est la vitesse de la détonation. Le nombre de Mach est présenté en remplaçant l'expression de la vitesse du son

$$M^2 = (D/c_0)^2 = \frac{\rho_0 D^2}{\gamma p_0} (1 - b\rho_0) \quad (\text{C.43})$$

De la droite de Rayleigh, il s'ensuit

$$p = p_0 - (\rho_0 D)^2 (v - v_0) \quad (\text{C.44})$$

$$y = 1 - \gamma M^2 (x - 1) \quad (\text{C.45})$$

De la même manière, la courbe d'Hugoniot se présente sous la forme suivante

$$e - e_0 + \frac{p + p_0}{2}(v - v_0) = q \quad (\text{C.46})$$

$$\frac{1}{\gamma - 1} [p(v - b) - p_0(v_0 - b)] + \frac{p + p_0}{2}((v - b) - (v_0 - b)) = q \quad (\text{C.47})$$

$$y = \frac{q' + k - x}{kx - 1} \quad (\text{C.48})$$

On remarque que les équations C.48 et C.45 sont identiques avec les relations obtenues par une approximation de gaz parfait. Ainsi, l'équation quadratique à résoudre est finalement inchangée du cas gaz parfait :

$$\gamma M^2 k \cdot x^2 - (1 + k)(1 + \gamma M^2) \cdot x + 1 + k + q' + \gamma M^2 = 0 \quad (\text{C.49})$$

avec le discriminant

$$\Delta = (1 + k)^2 \left[1 + \frac{1 - k}{1 + k} \gamma M^2 \right]^2 - 4\gamma M^2 k q' \quad (\text{C.50})$$

La solution de l'équation précédente est obtenue

$$x = \frac{1}{(\gamma + 1)M^2} \left[1 + \gamma M^2 \pm \left\{ (1 - M^2)^2 - \frac{\gamma^2 - 1}{\gamma} q' M^2 \right\}^{1/2} \right] \quad (\text{C.51})$$

Les relations CJ sont dérivées de cette solution à partir de la condition $\{ \quad \}^{1/2} = 0$. Le nombre de Mach CJ du front de détonation est ainsi déduit

$$M = \frac{1}{2} \left\{ \left[\frac{\gamma^2 - 1}{\gamma} q' \right]^{1/2} + \left[\frac{\gamma^2 - 1}{\gamma} q' + 4 \right]^{1/2} \right\} \quad (\text{C.52})$$

De la même manière que le gaz parfait, les rapports de pression et de masse volumique sont obtenues

$$\frac{v - b}{v_0 - b} = \frac{\gamma}{\gamma + 1} + \frac{1}{(\gamma + 1)M^2} \quad (\text{C.53})$$

$$\frac{p}{p_0} = \frac{1 + \gamma M^2}{\gamma + 1} \quad (\text{C.54})$$

C.3 Couplage entre le solveur aérodynamique et la chimie

L'implémentation du module EOS nécessite de mettre à jour le solveur aérodynamique, dans notre cas, pour prendre en compte l'énergie apportée par les réactions chimiques. L'intégration de ce terme source se fait par le biais des variables primitives. L'équation d'énergie est ainsi développée en équation de pression faisant apparaître un terme source supplémentaire lié à la chimie. Cette méthode nécessite de prendre en compte la nouvelle équation d'état. Pour ce faire, la nouvelle intégration du terme source chimique est présentée. Les équations de conservation pour réaliser une combustion à volume constant qui sont celles obtenues à l'issue du splitting d'opérateurs sont rappelées

$$\text{Masse :} \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 \quad (\text{C.55})$$

$$\text{Quantité de mouvement :} \quad \frac{\partial \rho u}{\partial t} = 0 \quad (\text{C.56})$$

$$\text{Énergie totale :} \quad \frac{\partial \rho E}{\partial t} = 0 \quad (\text{C.57})$$

$$\text{Espèce chimique :} \quad \frac{\partial \rho Y_f}{\partial t} = \rho \dot{\omega} \quad (\text{C.58})$$

avec E l'énergie totale $E = \rho e + \frac{1}{2}\rho u^2 + \rho Y_f q$. En explicitant la pression dans l'équation d'énergie, on obtient l'équation de conservation utilisée dans le couplage entre le solveur aérodynamique et la chimie.

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{(\gamma - 1)\rho q \dot{\omega}}{1 - \rho b} \quad (\text{C.59})$$

Les effets de gaz réels se manifestent à travers le terme $1 - \rho b$.

Étude de convergence en maillage

Une étude de convergence a été réalisée afin de déterminer une résolution spatiale adéquate pour effectuer nos simulations. Nous ne présenterons que les résultats pour le modèle à trois étapes et la chimie détaillée car la convergence numérique pour une seule étape a été présentée de manière détaillée dans des travaux antérieurs de notre groupe utilisant RESIDENT [85]. Le domaine de calcul utilisé est un canal de $L_x = 100$ mm par $L_y = 2$ mm correspondant respectivement à $\sim 120 l_{\text{ind}}$ et $\sim 60 l_{\text{ind}}$ sur la hauteur du canal pour le modèle à trois étapes et la chimie détaillée. Quatre résolutions ont été testées : 2, 5, 10 et 20 points par longueur d'induction l_{ind} . Les détonations ont été amorcées en plaçant une région circulaire à haute pression et température ($p_{\text{ign}}/p_o \sim 34$, $\rho_{\text{ign}}/\rho_o \sim 6$). Une onde de choc se forme à un stade précoce qui se réfléchit sur les parois supérieure et inférieure, générant ensuite une interaction de chocs au centre du canal qui va transiter vers une détonation auto-entretenu (voir les structures cellulaires présentées sur les Figures. D.1 et D.2).

Les résultats sont indiqués pour les 60 premiers millimètres du canal. La chimie détaillée (Fig. D.1) montre clairement l'évolution de la taille des cellules à mesure que la résolution augmente, en partant d'une structure très régulière à $l_{\text{ind}}/2$, en admettant progressivement des échelles de longueur supplémentaires à mesure que des points supplémentaires sont inclus dans $\Delta x = l_{\text{ind}}$. Pour toutes les résolutions considérées, les détonations se déroulent en deux phases : (i) une première phase transitoire où les cellules sont plus petites et régulières ; une caractéristique typique des surdétonations. Pour des résolutions plus élevées, cette zone devient progressivement plus petite, allant de 40 mm à $l_{\text{ind}}/5$ à 15 mm à $l_{\text{ind}}/10$. Cette évolution est conforme à la discussion dans Gamezo et al. [203]. Les résultats pour $l_{\text{ind}}/10$ et $l_{\text{ind}}/20$ donnent approximativement la même longueur pour la phase initiale. (ii) une deuxième zone transitoire où les détonations convergent vers une vitesse de propagation constante et avec le même niveau d'irrégularité dans leurs structures cellulaires. Pour évaluer l'effet du mode d'amorçage, le centre de la zone circulaire utilisé pour amorcer la détonation a été décalé. Les simulations pour $l_{\text{ind}}/2$ et $l_{\text{ind}}/5$ ont été répétées avec cette configuration. Aucun changement n'a été obtenu, ce qui prouve l'indépendance du mode d'amorçage.

Pour la chimie de ramification en chaîne en trois étapes (Fig. D.2), contrairement à la chimie détaillée, la longueur de la zone transitoire initial est approximativement la même pour toutes les résolutions. Pourtant la structure cellulaire est supposée présenter des irrégularités supplémentaires à mesure que la résolution augmente. La dynamique de la détonation, la régularité et la taille des cellules restent essentiellement inchangées lorsque le nombre de points en l_{ind} est doublé, de 10 à 20. Des études antérieures utilisant des schémas de différences finies d'ordre élevé pour l'étude des détonations [85, 146] et autoignitions "MILD" [304] ont fait état d'une résolution numérique similaire.

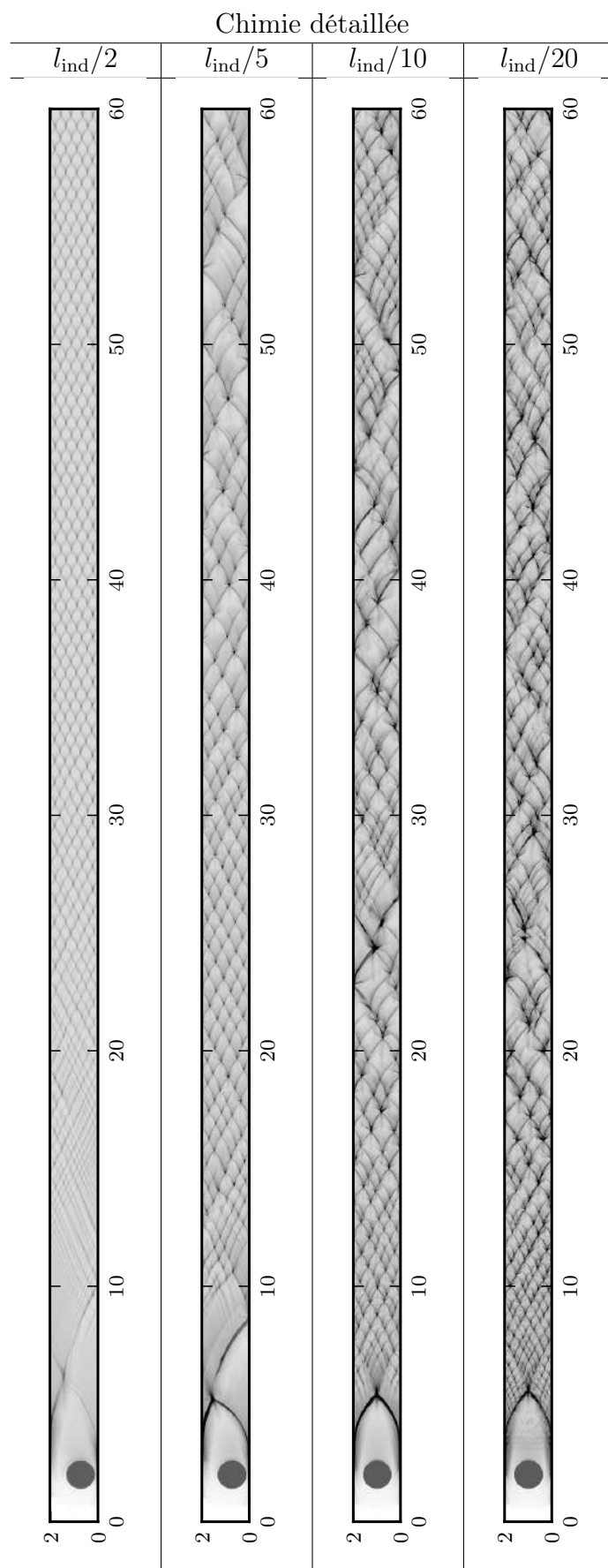


FIGURE D.1 – Numerical soot foils for detailed chemistry as a function of increasing resolution ($\Delta x = l_{\text{ind}}/k$, $k = 2, 5, 10$ and 20). Distances are in mm.

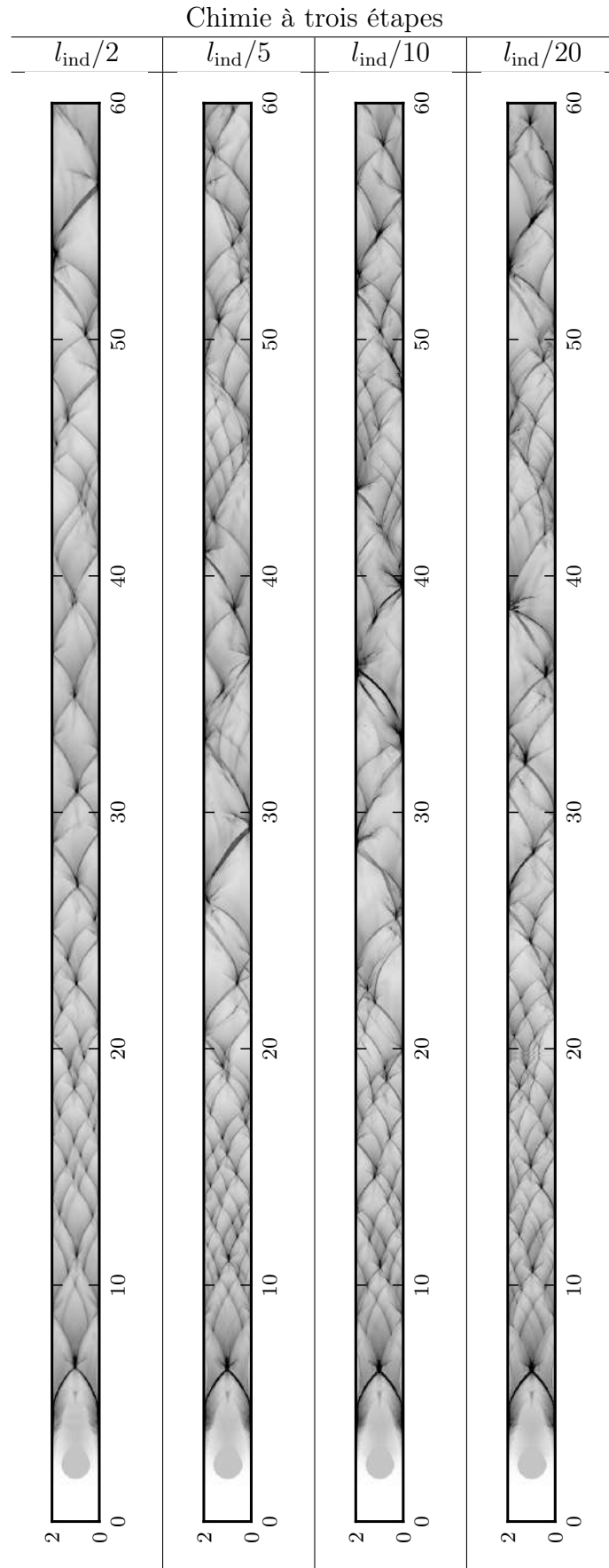


FIGURE D.2 – Numerical soot foils for three-step chain-branching chemistry as a function of increasing resolution ($\Delta x = l_{\text{ind}}/k$, $k = 2, 5, 10$ and 20). Distances are in mm.

Simulations complémentaires

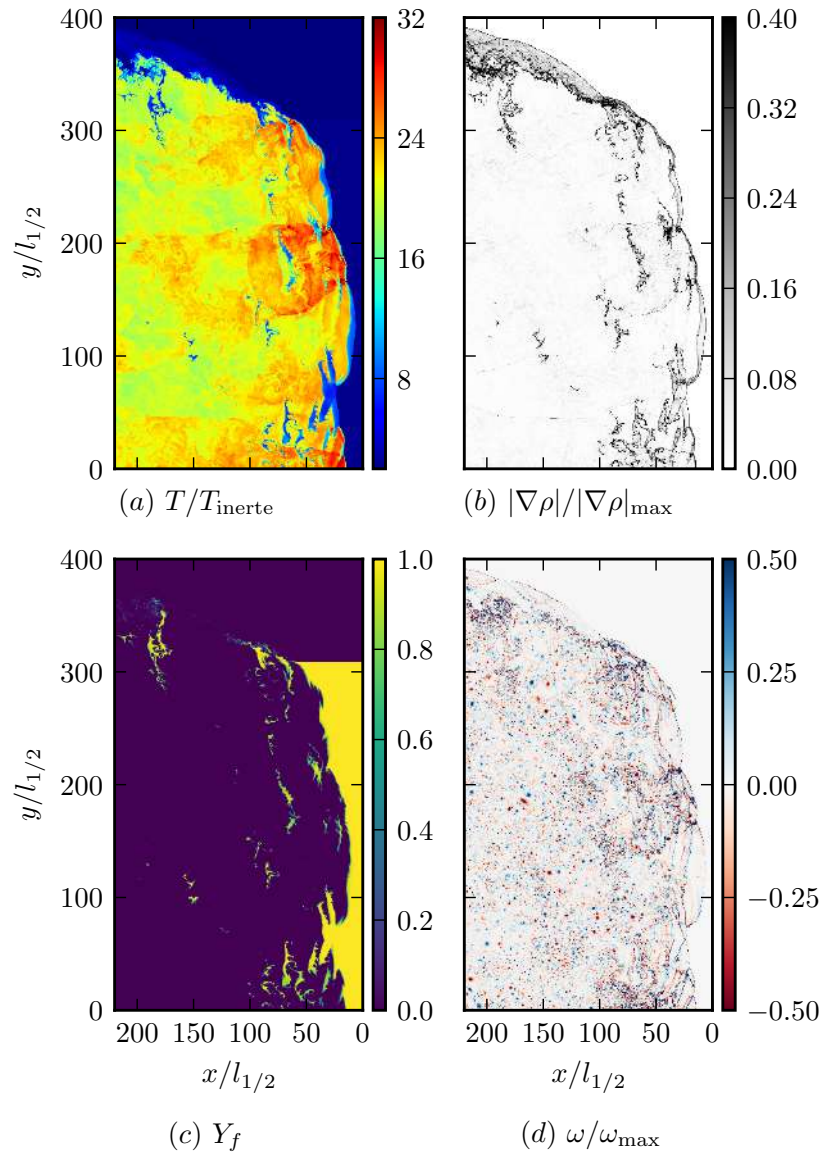


FIGURE E.1 – Visualisation de la détonation dans un milieu confiné par un gaz inerte. Le mélange considéré correspond à $E_a/R_u T_0 = 38.23$. La hauteur réactive est de $h_r = 28 \text{ mm} = 308 l_{1/2} \approx 14 \lambda$.

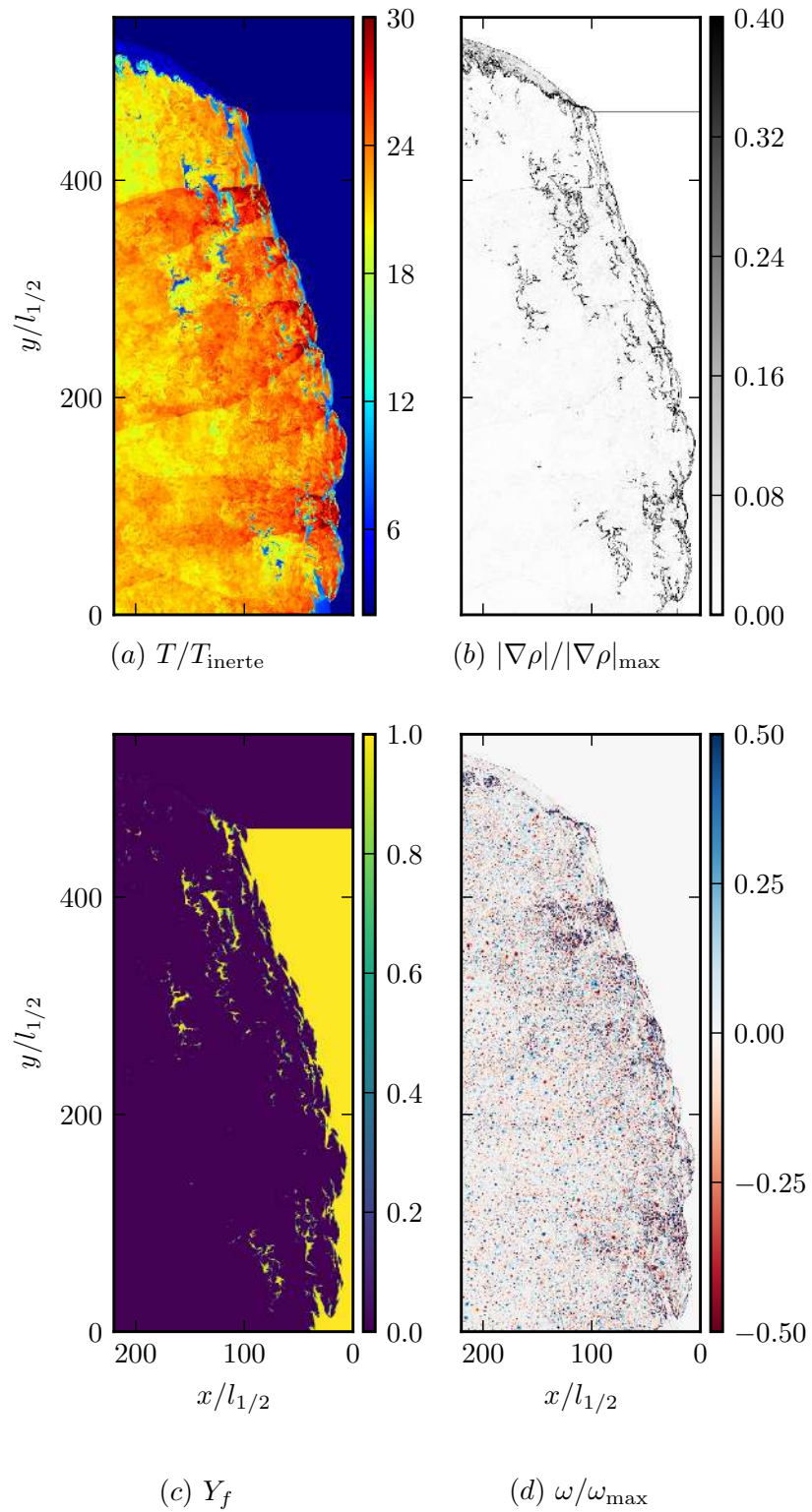


FIGURE E.2 – Visualisation de la détonation dans un milieu confiné par un gaz inerte. Le mélange considéré correspond à $E_a/R_u T_0 = 38$. La hauteur réactive est de $h_r = 42 \text{ mm} = 462 l_{1/2} \approx 21 \lambda$.

Liste de publications

Influence of the chemical modeling on the quenching limits of gaseous detonation waves confined by an inert layer



Influence of the chemical modeling on the quenching limits of gaseous detonation waves confined by an inert layer

Said Taïleb*, Josué Melguizo-Gavilanes*, Ashwin Chinnayya

Institut Prisme, UPR 3346 CNRS, ISAE-ENSMA, Université de Poitiers, Futuroscope-Chasseneuil 86961, France



ARTICLE INFO

Article history:
Received 4 December 2019
Revised 21 April 2020
Accepted 22 April 2020

Keywords:
Detonation dynamics
Chemistry modeling
Simplified kinetics
Detailed chemistry
Quenching limits
Numerical simulation

ABSTRACT

The effect of chemistry modeling on the flow structure and quenching limits of detonations propagating into reactive layers bounded by an inert gas is investigated numerically. Three different kinetic schemes of increasing complexity are used to model a stoichiometric H_2-O_2 mixture: single-step, three-step chain-branching and detailed chemistry. Results show that while the macroscopic characteristics of this type of detonations e.g. velocities, cell-size irregularity and leading shock dynamics, are similar among the models tested, their instantaneous structures are significantly different before and upon interaction with the inert layer when compared using a fixed height. When compared at their respective critical heights, h_{crit} , i.e. the reactive layer height at which successful detonation propagation is no longer possible, similarities in their structures become apparent. The numerically predicted critical heights increase as $h_{crit, Detailed} \ll h_{crit, 3-step} < h_{crit, 1-step}$. Notably, $h_{crit, Detailed}$ was found to be in agreement with experimentally reported values. The physical mechanisms present in detailed chemistry and neglected in simplified kinetics, anticipated to be responsible for the discrepancies obtained, are discussed in detail.

© 2020 The Combustion Institute. Published by Elsevier Inc. All rights reserved.

1. Introduction

A detonation is a combustion front coupled with a strong leading shock wave that travels supersonically with respect to reactants at rest. Its propagation mechanism can be summarized as follows: (i) the shock wave compresses and heats up fresh reactants; (ii) due to the high temperature sensitivity of the chemistry this abrupt temperature increase results in very fast chemical reactions; and (iii) the volumetric expansion of the burnt gases across the reaction zone drives the leading shock wave forward. A strong coupling between the leading shock wave and the reaction zone is a key feature of self-sustained detonation waves [1]. The one-dimensional laminar structure of a detonation is then composed of an induction length, l_{ind} (i.e. the distance between the leading shock and the start of heat release), and a reaction zone across which temperature increases and density decreases resulting in flow expansion until the flow velocity reaches the speed of sound in burnt products in a frame of reference attached to the shock, i.e. sonic point. The distance between the leading shock and the sonic plane is typically referred to as the hydrodynamic thickness, h_t [2,3].

In reality, detonations exhibit an unsteady multidimensional cellular structure that departs significantly from its laminar description [4] drawn by the triple points formed by the interaction of the leading shock, and transverse waves traveling along the height of the wave. As a result, l_{ind} and h_t (characteristic length scales of detonations) become dynamic entities. Any disturbance coming towards the leading shock and reaction zone complex from regions downstream of the hydrodynamic thickness will not affect the dynamics of the detonation wave. However, it remains vulnerable to the influence of the boundaries confining the wave. The nature of these boundaries and their length scale ratios to the detonation cell size, λ , and/or h_t , result in a detonation velocity deficit, defined as a percentage of the ideal detonation propagation velocity (Chapman–Jouguet – CJ), D/D_{CJ} , and eventual quenching. Various boundary conditions have been investigated in literature. They can be classified in two main categories: (i) smooth boundaries, such as constant cross section tubes [5], divergent channels [6] and yielding confinements [7]; and (ii) rough boundaries, such as tubes with obstacles [8] and porous walls [9]. The main failure mechanisms described are lateral expansion waves and attenuation of transverse waves that lead to the decoupling of the leading shock wave and the reaction zone. Experimental evidence shows that the quenching process differs depending on the mixture regularity. In [9] the critical dimension for detonation propagation in porous walls was determined to be 11λ and 4λ , for mixtures exhibiting a regular and irregular cellular structures,

* Corresponding author.
E-mail addresses: said.taïleb@ensma.fr (S. Taïleb), jmelguizo-gavilanes@cnsr-prime.fr (J. Melguizo-Gavilanes).

<https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2020.04.018>

0010-2180/© 2020 The Combustion Institute. Published by Elsevier Inc. All rights reserved.

Computation of the mean hydrodynamic structure of gaseous detonations with losses

Shock Waves
<https://doi.org/10.1007/s00193-020-00964-x>

ORIGINAL ARTICLE



Computation of the mean hydrodynamic structure of gaseous detonations with losses

M. Reynaud^{1,2} · S. Taileb¹ · A. Chinnayya¹

Received: 5 September 2019 / Revised: 2 July 2020 / Accepted: 21 July 2020
 © Springer-Verlag GmbH Germany, part of Springer Nature 2020

Abstract

In this paper, computations of gaseous detonations in several configurations are performed and discussed. The objective is to investigate the detonation characteristics, specially the influence of losses, through a quantitative analysis of the mean hydrodynamic structure. The results are divided into two parts: The first one relates to the propagation of ideal detonations without losses and to their characterization for a specific set of thermodynamic parameters, and the second part investigates the influence of losses on the averaged hydrodynamic structure of detonations. This is achieved by means of a specific and canonical configuration, in which a detonation wave propagates in a reactive layer bounded by an inert gas. This topology is investigated through a comparison of the instantaneous flow-field, cellular structure, and averaged quantities such as the mean curvature and the hydrodynamic thickness. This configuration may be regarded as non-ideal, as the detonation experiences losses due to the expansion of the detonation products toward the inert layer. The prediction of the detonation characteristics, as well as the conditions at which quenching occurs, remains a challenge when losses are involved. The main objective is to assess to what extent the hydrodynamic thickness can be used as a relevant length scale in the analysis of the resulting database. The results also highlight the key features of this configuration, which isolates a specific issue related to the rotating detonation engines. The temperature of the inert layer strongly affects the structure of the detonation–shock combined wave. For a high-temperature inert gas confinement, a detached shock appears in the upper layer and a jet of fresh mixture develops downstream of the front. For this condition, we observed a reduction in the critical dimensions by a factor of two. The degree of regularity of the detonation structure, from weakly unstable to mildly unstable cases, through the variation of the reduced activation energy, was investigated. The hydrodynamic thickness appears to be a useful characteristic length scale for the detonation, as it allows a better analysis of the results and a scaling of data. Moreover, the detonation velocity deficit can be globally expressed as a function of the ratio of the hydrodynamic thickness to the mean radius of curvature at the bottom of the wall.

Keywords Detonation · Hydrodynamic thickness · Losses

1 Introduction

The propagation of gaseous detonation waves involves chaotic reactive gasdynamic phenomena. As a result, the characteristics of the instantaneous flow-field behind the front are extremely irregular. Interactions between shock waves and vortices lead to a great amount of hydrodynamic fluctuations, i.e., non-equilibrium turbulence. Because of the chaotic behavior associated with the detonation wave, the use of numerical simulations to predict the detonation properties at large scale is very stochastic and thus difficult. Conditions under which the detonation wave can propagate or not are critical for industrial safety assessment and for propulsion. Thus, it is of great interest to describe the detonation wave at

Communicated by G. Ciccarelli.

A. Chinnayya
 ashwin@ensma.fr

M. Reynaud
 maxime.reynaud@cea.fr

S. Taileb
 said.taileb@ensma.fr

¹ Institut Pprime, UPR 3346 CNRS, ENSMA, University of Poitiers, 1, Avenue Clément Ader, BP 40109, 86961 Futuroscope-Chasseneuil Cedex, France

² CEA, DAM, Ile-de-France, 91297 Arpajon, France

Published online: 27 September 2020

Springer

Numerical study of 3D gaseous detonations in a square channel

Aerotecnica Missili & Spazio, *The Journal of Aerospace Science, Technology and Systems*

Numerical study of 3D gaseous detonations in a square channel

S. Taileb, M. Reynaud, A. Chinnayya, F. Virot, P. Bauer^a

^aInstitut Pprime, UPR 3346 CNRS-ENSMA-University of Poitiers,
BP 40109, 86961 Futuruscope Cedex, France

Abstract

The multidimensional structure of mildly unstable detonations are examined by numerical computations. These phenomenon have grown in interest since the development of propulsion devices such as pulsed and rotating detonation engines. Rectangular, diagonal and spinning modes are observed in a near-limit propagation detonation. High-order numerical integration of the reactive Euler equations have been performed to analyze the averaged structure, the shock dynamics of a single-cell detonation propagating in a square channel. Computations show a good agreement with the experimental cellular structure, showing the relevance of the slapping waves in the rectangular modes. The hydrodynamic thickness as well as the pdf shock dynamics are similar in the 2D and 3D cases, but the mean quantities vary on a quantitative basis. Moreover, the presence of strong forward jets is attested, which comes from simultaneous triple point line collisions with the walls.

1. Introduction

The gaseous detonation is a highly energetic phenomenon with fast reaction rates. An abrupt increase in the thermodynamic state, caused by a compression shock of the reactive medium leads to the chemical reaction initiation. Hence, the reactants are converted into products and expand downstream, self-sustaining the detonation front. These phenomena are involved in many application areas, such as propulsion, oil manufacturing, military devices, ballistics and industrial safety.

Detonations are naturally organized through a three-dimensional and transient structure. The latter is mainly formed of incident shocks and Mach stems, separated by triple point lines propagating onto the front surface. There are transverse waves at these junctions, which develop downstream of the detonation front and which propagate back and forth perpendicularly to the propagation direction. The trajectories of the triple point lines form the cellular structure of the detonation, of which height is closely related to the induction zone length. The generated flow downstream of the front is highly turbulent and the generated vortexes interact with the transverse shocks. Most of numerical studies have limited the investigation of this complex behavior to two-dimensional configurations. Because of limited diagnostics, the three-dimensional structure of the detonation and these interactions cannot be experimentally completely re-

solved in detail. Recently, performing 3D numerical simulations is becoming much more affordable with the increase of the computational capabilities. Thus, to some extent, it can offer a more accurate insight and a better understanding of the detonation dynamics.

Three dimensional numerical simulations were first performed by Williams et al. [1]. The computation were focused towards the detonation propagation in a square-channel and used a single-step global reaction modeling. The front structure was observed to be divided into rectangular areas delimited by the triple point lines. The comparison with two-dimensional computations revealed the presence of a slapping wave and a more intricate vorticity field in the three-dimensional case. Experimental studies were carried out by Hanana et al. [2] in order to confirm these numerical observations. They identified the rectangular mode of propagation and discovered the diagonal mode. This classification is the result of the triple point line trajectories onto the front surface. From the soot plate records, the motion of the triple point lines was found to be perpendicular to the walls in the rectangular mode, whereas in the case of diagonal mode, these lines move along the diagonal of the square section. Tsuboi et al. [3] performed numerical simulations with a detailed kinetic reaction mechanism and confirmed the earlier observations. Furthermore, they found out that the rectangular mode can be separated into two distinct behaviors: on-phase and out-of-phase. The simulations of Deiterding et al. [4] showed that the cell size differs between the different three dimensional modes, even though their geometri-

⁰ ©AIDAA, Associazione Italiana di Aeronautica e Astronautica

Bibliographie

1. *Ressources et consommation énergétiques mondiales* https://fr.wikipedia.org/wiki/Ressources_et_consommation_energetiques_mondiales (cf. page 1).
2. *LE TOURISME MONDIAL CONSOLIDE SA CROISSANCE EN 2019* <https://www.unwto.org/fr/le-tourisme-mondial-consolide-sa-croissance-en-2019> (cf. page 1).
3. DOROSHENKO, V, NAUMOV, A, LAZKO, V & VANIK, I. SpaceX's Interplanetary Transport System (2020) (cf. page 1).
4. NEJAAMTHEEN, M. N., KIM, J.-M. & CHOI, J.-Y. *Detonation Control for Propulsion* 109-159 (Springer, 2018) (cf. page 1).
5. CRABTREE, G. W., DRESSELHAUS, M. S. & BUCHANAN, M. V. The hydrogen economy. *Physics today* **57**, 39-44 (2004) (cf. page 1).
6. 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).
7. 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).
8. CHAPMAN, L. D. VI. On the rate of explosion in gases. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science* **47**, 90-104 (1899) (cf. page 6).
9. FICKETT, W. & DAVIS, W. C. *Detonation : theory and experiment* (Courier Corporation, 2000) (cf. pages 8, 9, 222).
10. VIEILLE, P. Sur le rôle des discontinuités dans les phénomènes de propagation. *Mémoire des Poudres et Salpêtres* **10**, 177 (1900) (cf. page 9).
11. 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. page 9).
12. NEUMANN, J. V. Theory of detonation waves (OD-02). *Technical Report, National Defense Research Committee of the Office of Scientific Research and Development*. (1942) (cf. page 9).
13. DÖRING, W. On detonation processes in gases. *Ann. Phys* **43**, 9 (1943) (cf. page 9).

14. CLAVIN, P. & SEARBY, G. *Combustion waves and fronts in flows : flames, shocks, detonations, ablation fronts and explosion of stars* (Cambridge University Press, 2016) (cf. pages 13, 91).
15. LEE, J. H. S. *The detonation phenomenon* (Cambridge University Press, 2008) (cf. pages 13, 25).
16. ERPENBECK, J. J. Stability of Steady-State Equilibrium Detonations. *The physics of Fluids* **5**, 604-614 (1962) (cf. page 14).
17. ERPENBECK, J. J. Stability of idealized one-reaction detonations. *The Physics of Fluids* **7**, 684-696 (1964) (cf. page 14).
18. ERPENBECK, J. J. Nonlinear Theory of Unstable One-Dimensional Detonations. *The Physics of Fluids* **10**, 274-289 (1967) (cf. page 14).
19. 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 14).
20. BOURLIOUX, A. & MAJDA, A. J. Theoretical and numerical structure for unstable two-dimensional detonations. *Combustion and Flame* **90**, 211 -229 (1992) (cf. page 14).
21. NAMAHA, G., BRAUNER, C, BUCKMASTER, J & SCHMIDT-LAINE, C. *Dynamical Issues in Combustion Theory* 229-239 (Springer, 1991) (cf. page 14).
22. HE, L. & LEE, J. H. The dynamical limit of one-dimensional detonations. *Physics of Fluids* **7**, 1151-1158 (1995) (cf. page 14).
23. SHARPE, G. Linear stability of idealized detonations. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences* **453**, 2603-2625 (1997) (cf. page 14).
24. SHORT, M. & QUIRK, J. J. On the nonlinear stability and detonability limit of a detonation wave for a model three-step chain-branching reaction. *Journal of Fluid Mechanics* **339**, 89-119 (1997) (cf. pages 14, 17, 42, 113).
25. SHORT, M. Multidimensional linear stability of a detonation wave at high activation energy. *SIAM Journal on Applied Mathematics* **57**, 307-326 (1997) (cf. page 14).
26. SHORT, M. & STEWART, D. S. Cellular detonation stability. Part 1. A normal-mode linear analysis. *Journal of Fluid Mechanics* **368**, 229-262 (1998) (cf. page 14).
27. LIANG, Z, KHASTOO, B & BAUWENS, L. Effect of reaction order on stability of planar detonation waves. *International Journal of Computational Fluid Dynamics* **19**, 131-142 (2005) (cf. pages 14, 42).

28. SHARPE, G. & FALLE, S. Numerical simulations of pulsating detonations : I. Nonlinear stability of steady detonations. *Combustion Theory and Modelling* **4**, 557-574 (2000) (cf. page 14).
29. RADULESCU, M. I. & TANG, J. Nonlinear dynamics of self-sustained supersonic reaction waves : Fickett's detonation analogue. *Physical review letters* **107**, 164503 (2011) (cf. page 15).
30. NG, H, HIGGINS, A, KIYANDA, C, RADULESCU, M, LEE, J. H. S., BATES, K & NIKIFORAKIS, N. Nonlinear dynamics and chaos analysis of one-dimensional pulsating detonations. *Combustion Theory and Modelling* **9**, 159-170 (2005) (cf. pages 15, 17).
31. 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. pages 15, 16).
32. FEIGENBAUM, M. J. Universal behavior in nonlinear systems. *Physica D : Nonlinear Phenomena* **7**, 16-39 (1983) (cf. page 16).
33. SHORT, M. A nonlinear evolution equation for pulsating Chapman–Jouguet detonations with chain-branching kinetics. *Journal of Fluid Mechanics* **430**, 381-400 (2001) (cf. page 16).
34. CLIFFORD, L., MILNE, A., TURANYI, T & BOULTON, D. An induction parameter model for shock-induced hydrogen combustion simulations. *Combustion and flame* **113**, 106-118 (1998) (cf. page 17).
35. SICHEL, M. e., TONELLO, N., ORAN, E. & JONES, D. A two-step kinetics model for numerical simulation of explosions and detonations in H₂–O₂ mixtures. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences* **458**, 49-82 (2002) (cf. page 17).
36. SHORT, M. & SHARPE, G. J. Pulsating instability of detonations with a two-step chain-branching reaction model : theory and numerics. *Combustion Theory and Modelling* **7**, 401-416 (2003) (cf. page 17).
37. NG, H. D. & LEE, J. H. Direct initiation of detonation with a multi-step reaction scheme. *Journal of Fluid Mechanics* **476**, 179-211 (2003) (cf. page 17).
38. 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 17, 26, 113).
39. FICKETT, W & DAVIS, W. Detonation (Berkeley. *University of California Press* **226**, 1984-163 (1979) (cf. page 17).

40. NG, H., RADULESCU, M., HIGGINS, A., NIKIFORAKIS, N & LEE, J. Numerical investigation of the instability for one-dimensional Chapman–Jouguet detonations with chain-branching kinetics. *Combustion Theory and Modelling* **9**, 385-401 (2005) (cf. pages 18, 96).
41. NG, H. D. & ZHANG, F. *Shock Waves Science and Technology Library* 107-212 (2012) (cf. page 18).
42. HAN, W., MA, W., QIAN, C., WEN, J. & WANG, C. Bifurcation of pulsation instability in one-dimensional H₂-O₂ detonation with detailed reaction mechanism. *Physical Review Fluids* **4**, 103202 (2019) (cf. page 18).
43. 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 (Resumed)* **129**, 3010-3021 (1926) (cf. page 18).
44. CAMPBELL, C. & WOODHEAD, D. W. CCVII.—Striated photographic records of explosion-waves. *Journal of the Chemical Society (Resumed)*, 1572-1578 (1927) (cf. page 18).
45. VOITSEKHOVSKII, B. V., MITROFANOV, V. V. & TOPCHIAN, M. E. Struktura fronta detonastii i gaza. *Akad. Nauk., SSSR, Novosibirsk* (1963) (cf. page 18).
46. WHITE, D. R. Turbulent Structure of Gaseous Detonation. *Physics of Fluids* **4**, 465-480 (1961) (cf. page 18).
47. RADULESCU, M. I., SHARPE, G. J., LAW, C. K. & LEE, J. H. The hydrodynamic structure of unstable cellular detonations. *Journal of Fluid Mechanics* **580**, 31–81 (2007) (cf. pages 19, 99, 105).
48. ANTOLIK, K. Das Gleiten elektrischer Funken. *Annalen der Physik* **230**, 14-37 (1875) (cf. page 20).
49. 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 20).
50. DENISOV, Y. N. & TROSHIN, Y. K. On the mechanism of detonative combustion. *Symposium (International) on Combustion* **8**, 600 -610 (1961) (cf. page 20).
51. OPPENHEIM, A. Novel insight into the structure and development of detonation. (1965) (cf. page 20).
52. STREHLOW, R. A. & CROOKER, A. J. The structure of marginal detonation waves. *Acta Astronautica* **1**, 303 -315 (1974) (cf. pages 20, 21).

53. MOEN, I. O., FUNK, J. W., WARD, S., RUDE, G. & THIBAUT, P. Detonation length scales for fuel-air explosives. *Prog. Astronaut. Aeronaut* **94**, 55-79 (1984) (cf. page 20).
54. MITROFANOV, V. V. & SOLOUKHIN, R. I. *The diffraction of multifront detonation waves Soviet Physics Doklady* **9** (1965), 1055 (cf. pages 20, 30).
55. 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. pages 20, 30).
56. LEE, J. H. S. Dynamic Parameters of Gaseous Detonations. *Annual Review of Fluid Mechanics* **16**, 311-336 (1984) (cf. page 20).
57. 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 20).
58. DESBORDES, D. & PRESLES, H.-N. *Shock Waves Science and Technology Library, Vol. 6* 281-338 (Springer, 2012) (cf. pages 20, 22, 140).
59. 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 21, 84, 117).
60. 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. pages 21, 40).
61. 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 21).
62. 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 21).
63. VASIL'EV, A., MITROFANOV, V. & TOPCHIYAN, M. Detonation waves in gases. *Combustion, Explosion and Shock Waves* **23**, 605-623 (1987) (cf. page 21).
64. 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 22).
65. 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. pages 22, 26).

66. CAMPBELL, C. & WOODHEAD, D. W. CCVII.-Striated photographic records of explosion-waves. *Journal of the Chemical Society*, 1572-1578 (1927) (cf. page 22).
67. SCHOTT, G. L. Observations of the structure of spinning detonation. *The Physics of Fluids* **8**, 850-865 (1965) (cf. page 22).
68. WASHIZU, T & FUJIWARA, T. *Numerical study of spinning detonation Proceedings of 14th International Colloquium on the Dynamics of Explosion and Reactive Systems (ICDERS), Coimbra* **2** (1993), D1-9 (cf. page 22).
69. TSUBOI, N. & HAYASHI, A. K. Numerical study on spinning detonations. *Proceedings of the Combustion Institute* **31**, 2389-2396 (2007) (cf. page 22).
70. SHCHELKIN, K. I. & TROSHIN, Y. K. *Gasdynamics of combustion* (National Aeronautics et Space Administration, 1964) (cf. page 22).
71. SHCHELKIN, K. I. & TROSHIN, Y. K. Non-stationary phenomena in the gaseous detonation front. *Combustion and Flame* **7**, 143 -151 (1963) (cf. page 22).
72. 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. pages 22, 40).
73. NG, H. D. *The effect of chemical reaction kinetics on the structure of gaseous detonation* thèse de doctorat (McGill University, 2005) (cf. pages 23, 91).
74. KANESHIGE, M. & SHEPHERD, J. E. *Detonation database* rapport technique FM97-8 (GALCIT, 1997) (cf. page 23).
75. STREHLOW, R. A. & ENGEL, C. D. Transverse Waves in Detonations : II. Structure and Spacing in $H_2 - O_2$, $C_2H_2 - O_2$, $CH_4 - O_2$ Systems. *AIAA Journal* **7**, 492-496 (1969) (cf. page 23).
76. SOLOUKHIN, R. I. Multiheaded structure of gaseous detonation. *Combustion and Flame* **10**, 51-58 (1966) (cf. pages 23, 139).
77. SOLOUKHIN, R. *Nonstationary phenomena in gaseous detonation Symposium (International) on Combustion* **12** (1969), 799-807 (cf. page 23).
78. 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. page 23).
79. 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. page 23).

80. WEBER, M. & OLIVIER, H. The thickness of detonation waves visualised by slight obstacles. *Shock Waves* **13**, 351-365 (2003) (cf. page 24).
81. 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. page 24).
82. JARSALÉ, G., VIROT, F. & CHINNAYYA, A. Ethylene-air detonation in water spray. *Shock Waves* **26**, 561-572 (2016) (cf. page 24).
83. LEE, J. H. S. & RADULESCU, M. I. On the hydrodynamic thickness of cellular detonations. *Combustion, Explosion, and Shock Waves* **41**, 745-765 (2005) (cf. pages 24, 150).
84. 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 24, 63, 99).
85. 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 24, 40, 99, 112, 113, 141, 225, 226).
86. WATANABE, H., MATSUO, A., CHINNAYYA, A., MATSUOKA, K., KAWASAKI, A. & KASAHARA, J. Numerical analysis of the mean structure of gaseous detonation with dilute water spray. *Journal of Fluid Mechanics* **887** (2020) (cf. pages 24, 99).
87. ECKETT, C. A. *Numerical and analytical studies of the dynamics of gaseous detonations* thèse de doctorat (California Institute of Technology, 2001) (cf. pages 24, 143).
88. OPPENHEIM, A. & SOLOUKHIN, R. Experiments in gasdynamics of explosions. *Annual Review of Fluid Mechanics* **5**, 31-58 (1973) (cf. page 24).
89. KAGAN, L & SIVASHINSKY, G. The transition from deflagration to detonation in thin channels. *Combustion and Flame* **134**, 389-397 (2003) (cf. page 25).
90. ORAN, E. S. & GAMEZO, V. N. Origins of the deflagration-to-detonation transition in gas-phase combustion. *Combustion and Flame* **148**, 4-47 (2007) (cf. pages 25, 40).
91. POLUDNENKO, A. Y., CHAMBERS, J., AHMED, K., GAMEZO, V. N. & TAYLOR, B. D. A unified mechanism for unconfined deflagration-to-detonation transition in terrestrial chemical systems and type Ia supernovae. *Science* **366** (2019) (cf. page 25).

92. DESHAIES, B & JOULIN, G. Flame-speed sensitivity to temperature changes and the deflagration-to-detonation transition. *Combustion and flame* **77**, 201-212 (1989) (cf. page 25).
93. KAGAN, L. & SIVASHINSKY, G. Transition to detonation of an expanding spherical flame. *Combustion and Flame* **175**, 307-311 (2017) (cf. page 25).
94. GORDON, P. V., KAGAN, L. & SIVASHINSKY, G. Parametric transition from deflagration to detonation revisited : Planar geometry. *Combustion and Flame* **211**, 465-476 (2020) (cf. page 25).
95. TOWER, C. A., POLUDNENKO, A. Y. & HAMLINGTON, P. E. Detonation initiation by compressible turbulence thermodynamic fluctuations. *Combustion and Flame* **213**, 172-183 (2020) (cf. page 25).
96. ORAN, E. S. Understanding explosions—from catastrophic accidents to creation of the universe. *Proceedings of the Combustion Institute* **35**, 1-35 (2015) (cf. page 25).
97. KAILASANATH, K. Review of propulsion applications of detonation waves. *AIAA journal* **38**, 1698-1708 (2000) (cf. page 25).
98. KAILASANATH, K. *Innovations in Sustainable Energy and Cleaner Environment* 3-21 (Springer, 2020) (cf. page 25).
99. REYNAUD, M. *Modélisation numérique des détonations confinées par un gaz inerte* thèse de doctorat (Chasseneuil-du-Poitou, Ecole nationale supérieure de mécanique et d . . . , 2017) (cf. pages 25, 141, 182, 192, 198).
100. 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 26).
101. KISTIAKOWSKY, G. B. & ZINMAN, W. G. Gaseous Detonations. VII. A Study of Thermodynamic Equilibration in Acetylene-Oxygen Waves. *The Journal of Chemical Physics* **23**, 1889-1894 (1955) (cf. page 26).
102. 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 26).
103. FAY, J. A. A mechanical theory of spinning detonation. *The journal of chemical physics* **20**, 942-950 (1952) (cf. page 26).
104. 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 26).

105. 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 26).
106. ZELDOVICH, I. B. An experimental investigation of spherical detonation of gases. *Soviet Phys. Tech. Phys.* **1**, 1689-1713 (1956) (cf. page 26).
107. FAY, J. A. Two-dimensional gaseous detonations : velocity deficit. *Physics of Fluids* **2**, 283-289 (1959) (cf. page 26).
108. 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 26).
109. 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 26).
110. TEODORCZYK, A. & LEE, J. H. S. Detonation attenuation by foams and wire meshes lining the walls. *Shock Waves* **4**, 225-236 (1995) (cf. page 26).
111. VASIL'EV, A. A. Near-limiting detonation in channels with porous walls. *Combustion, Explosion and Shock Waves* **30**, 101-106 (1994) (cf. page 26).
112. RADULESCU, M. I. *The propagation and failure mechanism of gaseous detonations : experiments in porous-walled tubes* thèse de doctorat (McGill University, 2003) (cf. pages 26, 91, 133, 142).
113. 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 27, 40).
114. 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 27).
115. SOUSA, J., PANIAGUA, G. & MORATA, E. C. Thermodynamic analysis of a gas turbine engine with a rotating detonation combustor. *Applied energy* **195**, 247-256 (2017) (cf. page 28).
116. SOMMERS, W. P. *The interaction of a detonation wave with an inert boundary* thèse de doctorat (The University of Michigan, 1961) (cf. pages 28, 29, 30).
117. SOMMERS, W. P. & MORRISON, R. B. Simulation of condensed-explosive detonation phenomena with gases. *Physics of Fluids* **5**, 241-248 (1962) (cf. pages 28, 29).

118. DABORA, E. K. *The influence of a compressible boundary on the propagation of gaseous detonations* rapport technique 3559-E (NASA, 1963) (cf. pages 29, 31, 128).
119. 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 29, 31, 128, 129, 136).
120. ADAMS, T. G. Do weak detonation waves exist? *AIAA Journal* **16**, 1035-1040 (1978) (cf. pages 30, 112).
121. ADAMS, T. G. *Experimental investigation of the interaction of a detonation wave with a boundary gas* thèse de doctorat (Michigan State University, 1972) (cf. page 30).
122. VASIL'EV, A. A. Critical diameter of gas-mixture detonation. *Combustion, Explosion and Shock Waves* **18**, 349-355 (1982) (cf. page 30).
123. 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 30).
124. LEE, J., KNYSTAUTAS, R., GUIRAO, C., BEKESY, A & SABBAGH, S. On the instability of H₂-Cl₂ gaseous detonations. *Combustion and Flame* **18**, 321-325 (1972) (cf. page 30).
125. VASIL'EV, A. A. & ZAK, D. V. Detonation of gas jets. *Combustion, Explosion and Shock Waves* **22**, 463-468 (1986) (cf. page 31).
126. 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, 127).
127. 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. page 31).
128. 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. page 31).
129. RUDY, W., ZBIKOWSKI, M. & TEODORCZYK, A. Detonations in hydrogen-methane-air mixtures in semi confined flat channels. *Energy* **116**, 1479-1483 (2016) (cf. page 31).
130. 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. page 31).

131. 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. page 31).
132. ANDERSON, J. D & WENDT, J. *Computational fluid dynamics* (Springer, 1995) (cf. page 33).
133. BIRKINSHAW, M. The Sunyaev–Zel’dovich effect. *Physics Reports* **310**, 97-195 (1999) (cf. page 35).
134. KEE, R. J., RUPLEY, F. M., MEEKS, E. & MILLER, J. A. *CHEMKIN-III : A FORTRAN chemical kinetics package for the analysis of gas-phase chemical and plasma kinetics* rapport technique (Sandia National Labs., Livermore, CA (United States), 1996) (cf. page 37).
135. LE MÉTAYER, O. & SAUREL, R. The Noble-Abel Stiffened-Gas equation of state. *Physics of Fluids* **28**, 046102 (2016) (cf. pages 39, 91, 92, 217).
136. CHIAPOLINO, A. & SAUREL, R. Extended Noble-Abel Stiffened-Gas equation of state for sub-and-supercritical liquid-gas systems far from the critical point. *Fluids* **3**, 48 (2018) (cf. page 39).
137. RADULESCU, M. On the Noble-Abel stiffened-gas equation of state. *Physics of Fluids* **31**, 111702 (2019) (cf. pages 39, 91, 92).
138. KHOKHLOV, A., ORAN, E. & THOMAS, G. Numerical simulation of deflagration-to-detonation transition : the role of shock–flame interactions in turbulent flames. *Combustion and Flame* **117**, 323-339 (1999) (cf. page 40).
139. KHOKHLOV, A. M., ORAN, E. S., CHTCHELKANOVA, A. Y. & WHEELER, J. C. Interaction of a shock with a sinusoidally perturbed flame. *Combustion and flame* **117**, 99-116 (1999) (cf. page 40).
140. KHOKHLOV, A., AUSTIN, J., PINTGEN, F. & SHEPHERD, J. *Numerical study of the detonation wave structure in ethylene-oxygen mixtures 42nd AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit* (2004), 792 (cf. page 40).
141. KESSLER, D., GAMEZO, V. & ORAN, E. Simulations of flame acceleration and deflagration-to-detonation transitions in methane–air systems. *Combustion and Flame* **157**, 2063 -2077 (2010) (cf. page 40).
142. BAUWENS, L. & WILLIAMS, D. *Computation and visualization of detailed detonation structures 34th Aerospace Sciences Meeting and Exhibit* (1996), 343 (cf. page 40).

143. GAMEZO, V. N., OGAWA, T. & ORAN, E. S. Numerical simulations of flame propagation and DDT in obstructed channels filled with hydrogen–air mixture. *Proceedings of the Combustion Institute* **31**, 2463-2471 (2007) (cf. page 40).
144. SABZPOOSHANI, M. & MAZAHARI, K. Formation of unburnt pockets in gaseous detonations. *Combustion, Explosion, and Shock Waves* **45**, 182-189 (2009) (cf. page 40).
145. 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 40, 113).
146. MI, X., HIGGINS, A., KIYANDA, C., NG, H. & NIKIFORAKIS, N. Effect of spatial inhomogeneities on detonation propagation with yielding confinement. *Shock Waves* **28**, 993-1009 (2018) (cf. pages 40, 112, 121, 226).
147. CHIQUETE, C., SHORT, M. & QUIRK, J. J. The Effect of Curvature and Confinement on Gas-Phase Detonation Cellular Stability. *Proceedings of the Combustion Institute* **37**, 3565 -3573 (2019) (cf. page 40).
148. DAVIDENKO, D, MÉVEL, R & DUPRÉ, G. Numerical study of the detonation structure in rich H₂-NO₂/N₂O₄ and very lean H₂-N₂O mixtures. *Shock Waves* **21**, 85-99 (2011) (cf. page 40).
149. KHASAINOV, B., VIROT, F., PRESLES, H.-N. & DESBORDES, D. Parametric study of double cellular detonation structure. *Shock Waves* **23**, 213-220 (2013) (cf. page 40).
150. MÉVEL, R. & GALLIER, S. Structure of detonation propagating in lean and rich dimethyl ether–oxygen mixtures. *Shock Waves* **28**, 955-966 (2018) (cf. pages 40, 121).
151. SAXENA, P. & WILLIAMS, F. A. Testing a small detailed chemical-kinetic mechanism for the combustion of hydrogen and carbon monoxide. *Combustion and Flame* **145**, 316 -323 (2006) (cf. page 41).
152. HONG, Z., DAVIDSON, D. F. & HANSON, R. K. An improved H₂/O₂ mechanism based on recent shock tube/laser absorption measurements. *Combustion and Flame* **158**. Special Issue on Kinetics, 633 -644 (2011) (cf. page 41).
153. MÉVEL, R., SABARD, J., LEI, J. & CHAUMEIX, N. Fundamental combustion properties of oxygen enriched hydrogen/air mixtures relevant to safety analysis : Experimental and simulation study. *International Journal of Hydrogen Energy* **41**, 6905 -6916 (2016) (cf. page 41).
154. 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 42).

155. GRAY, B. & YANG, C. On the unification of the thermal and chain theories of explosion limits. *The Journal of Physical Chemistry* **69**, 2747-2750 (1965) (cf. page 42).
156. BIRKAN, M. A. & KASSOY, D. R. The unified theory for chain branching thermal explosions with dissociation-recombination and confinement effects. *Combustion science and technology* **44**, 223-256 (1986) (cf. page 42).
157. SHORT, M & DOLD, J. Linear stability of a detonation wave with a model three-step chain-branching reaction. *Mathematical and Computer Modelling* **24**, 115-123 (1996) (cf. pages 42, 91).
158. SHARPE, G. J. & MAFLAHI, N. Homogeneous explosion and shock initiation for a three-step chain-branching reaction model. *Journal of Fluid Mechanics* **566**, 163-194 (2006) (cf. page 42).
159. MELGUIZO-GAVILANES, J & BAUWENS, L. A comparison between constant volume induction times and results from spatially resolved simulation of ignition behind reflected shocks : implications for shock tube experiments. *Shock Waves* **23**, 221-231 (2013) (cf. page 42).
160. LIANG, Z. & BAUWENS, L. Cell structure and stability of detonations with a pressure-dependent chain-branching reaction rate model. *Combustion Theory and Modelling* **9**, 93-112 (2005) (cf. page 42).
161. LIANG, Z & BAUWENS, L. Detonation structure under chain branching kinetics. *Shock Waves* **15**, 247 (2006) (cf. page 42).
162. ARRHENIUS, S. Über die Reaktionsgeschwindigkeit bei der Inversion von Rohrzucker durch Säuren. *Zeitschrift für physikalische Chemie* **4**, 226-248 (1889) (cf. page 43).
163. WARNATZ, J., MAAS, U. & DIBBLE, R. W. Physical and chemical fundamentals, modeling and simulation, experiments, pollutant formation. *Springer, Berlin Frenklach M, Wang H (1990) Detailed kinetic modelling of soot particle nucleation and growth. Proc Comb Inst* **23**, 1559-1566 (2006) (cf. page 43).
164. KAPILA, A. Homogeneous branched-chain explosion : Initiation to completion. *Journal of Engineering Mathematics* **12**, 221-235 (1978) (cf. pages 46, 113).
165. TORO, E. F. *Riemann solvers and numerical methods for fluid dynamics : a practical introduction* (2013) (cf. pages 49, 52, 56).
166. SHEN, Z., YAN, W. & YUAN, G. A robust HLLC-type Riemann solver for strong shock. *Journal of Computational Physics* **309**, 185-206 (2016) (cf. pages 49, 54, 55).
167. SURESH, A & HUYNH, H. T. Accurate monotonicity-preserving schemes with Runge-Kutta time stepping. *Journal of Computational Physics* **136**, 83-99 (1997) (cf. pages 49, 50).

168. 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 49, 73).
169. COLELLA, P. & WOODWARD, P. R. The piecewise parabolic method (PPM) for gas-dynamical simulations. *Journal of computational physics* **54**, 174-201 (1984) (cf. pages 49, 73).
170. 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 49).
171. 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 49).
172. 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 49).
173. 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 49).
174. 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 52).
175. 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 52).
176. 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. page 52).
177. DAVIS, S. F. Simplified second-order Godunov-type methods. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing* **9**, 445-473 (1988) (cf. page 54).
178. QUIRK, J. J. *Upwind and High-Resolution Schemes* 550-569 (Springer, 1997) (cf. page 54).
179. SHU, C.-W. & OSHER, S. Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock-capturing schemes. *Journal of Computational Physics* **77**, 439-471 (1988) (cf. page 56).

180. 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 56).
181. STRANG, G. On the construction and comparison of difference schemes. *SIAM journal on numerical analysis* **5**, 506-517 (1968) (cf. page 57).
182. MOTT, D. R., ORAN, E. S. & van LEER, B. A quasi-steady-state solver for the stiff ordinary differential equations of reaction kinetics. *Journal of Computational physics* **164**, 407-428 (2000) (cf. page 58).
183. SAVARD, B, XUAN, Y., BOBBITT, B & BLANQUART, G. A computationally-efficient, semi-implicit, iterative method for the time-integration of reacting flows with stiff chemistry. *Journal of Computational Physics* **295**, 740-769 (2015) (cf. page 60).
184. 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 62).
185. 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. page 63).
186. 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. page 63).
187. SAVITZKY, A. & GOLAY, M. J. E. Smoothing and differentiation of data by simplified least squares procedures. *Analytical Chemistry* **36**, 1627-1639 (1964) (cf. page 67).
188. HADJADJ, A. & KUDRYAVTSEV, A. Computation and flow visualization in high-speed aerodynamics. *Journal of Turbulence*, N16 (2005) (cf. page 69).
189. QUIRK, J. J. & KARNI, S. On the dynamics of a shock–bubble interaction. *Journal of Fluid Mechanics* **318**, 129-163 (1996) (cf. page 69).
190. OCCIGEN. *C.I.N.E.S* <https://www.cines.fr/calcul/materiels/occigen/> (cf. page 70).
191. THOR. *Insitut Pprime* <https://www.pprime.fr/?q=fr/cluster-de-pprime-et-du-mesocentre> (cf. page 72).
192. COURANT, R. & FRIEDRICHS, K. O. *Supersonic flow and shock waves* (Springer Science & Business Media, 1999) (cf. page 73).

193. 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. page 73).
194. 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 73).
195. HARTEN, A. High resolution schemes for hyperbolic conservation laws. *Journal of computational physics* **49**, 357-393 (1983) (cf. page 73).
196. ROE, P. L. Characteristic-based schemes for the Euler equations. *Annual Review of Fluid Mechanics* **18**, 337-365 (1986) (cf. page 73).
197. JIANG, G.-S. & SHU, C.-W. Efficient implementation of weighted ENO schemes. *Journal of computational physics* **126**, 202-228 (1996) (cf. page 73).
198. FEDKIW, R. P., MERRIMAN, B. & OSHER, S. *Numerical methods for a mixture of thermally perfect and/or calorically perfect gaseous species with chemical reactions* (Department of Mathematics, University of California, Los Angeles, 1996) (cf. page 75).
199. SCHULZ-RINNE, C. W. Classification of the Riemann problem for two-dimensional gas dynamics. *SIAM journal on mathematical analysis* **24**, 76-88 (1993) (cf. pages 75, 78).
200. SCHULZ-RINNE, C. W., COLLINS, J. P. & GLAZ, H. M. Numerical solution of the Riemann problem for two-dimensional gas dynamics. *SIAM Journal on Scientific Computing* **14**, 1394-1414 (1993) (cf. pages 75, 78).
201. LAX, P. D. & LIU, X.-D. Solution of two-dimensional Riemann problems of gas dynamics by positive schemes. *SIAM Journal on Scientific Computing* **19**, 319-340 (1998) (cf. pages 75, 76).
202. KURGANOV, A. & TADMOR, E. Solution of two-dimensional Riemann problems for gas dynamics without Riemann problem solvers. *Numerical Methods for Partial Differential Equations : An International Journal* **18**, 584-608 (2002) (cf. page 75).
203. 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 82, 142, 225).
204. BEN-DOR, G. *Shock wave reflection phenomena* (Springer, 2007) (cf. pages 82, 102).
205. GAMEZO, V., DESBORDES, D & ORAN, E. Two-dimensional reactive flow dynamics in cellular detonation waves. *Shock waves* **9**, 11-17 (1999) (cf. page 84).

206. CHAMBERLAIN, G., ORAN, E. & PEKALSKI, A. Detonations in industrial vapour cloud explosions. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries* **62**, 103918 (2019) (cf. page 87).
207. HANSMETZGER, S, ZITOUN, R. & VIDAL, P. A study of continuous rotation modes of detonation in an annular chamber with constant or increasing section. *Shock Waves* **28**, 1065-1078 (2018) (cf. page 87).
208. SCHMITT, R. & BUTLER, P. Detonation properties of gases at elevated initial pressures. *Combustion Science and Technology* **106**, 167-191 (1995) (cf. pages 88, 90, 95, 97, 106).
209. SCHMITT, R. & BUTLER, P. Detonation wave structure of gases at elevated initial pressures. *Combustion science and technology* **107**, 355-385 (1995) (cf. pages 88, 90).
210. POEUF, S. *Équations d'état des produits de détonation des explosifs solides* thèse de doctorat (2018) (cf. page 88).
211. MIKART, M., COUNILH, D., GENSDARMES, F. & CHINNAYYA, A. CAPTURE OF PARTICLES DISPERSED BY DETONATION USING AN AQUEOUS FOAM CONFINEMENT. *WIT Transactions on Engineering Sciences* **120**, 83-93 (2018) (cf. page 88).
212. BDZIL, J. B. & STEWART, D. S. The dynamics of detonation in explosive systems. *Annu. Rev. Fluid Mech.* **39**, 263-292 (2007) (cf. page 88).
213. HANDLEY, C., LAMBOURN, B., WHITWORTH, N., JAMES, H. & BELFIELD, W. Understanding the shock and detonation response of high explosives at the continuum and meso scales. *Applied Physics Reviews* **5**, 011303 (2018) (cf. page 88).
214. POEUF, S., GENETIER, M., LEFRANÇOIS, A., OSMONT, A., BAUDIN, G. & CHINNAYYA, A. Investigation of JWL Equation of State for Detonation Products at Low Pressure With Radio Interferometry. *Propellants, Explosives, Pyrotechnics* **43**, 1157-1163 (2018) (cf. page 88).
215. BAUER, P., PRESLES, H., HEUZE, O & BROCHET, C. Measurement of cell lengths in the detonation front of hydrocarbon oxygen and nitrogen mixtures at elevated initial pressures. *Combustion and Flame* **64**, 113-123 (1986) (cf. page 89).
216. HEUZÉ, O. Equations of state of detonation products : Influence of the repulsive intermolecular potential. *Physical Review A* **34**, 428 (1986) (cf. page 89).
217. SIRIGNANO, W. A. Compressible flow at high pressure with linear equation of state. *Journal of Fluid Mechanics* **843**, 244-292 (2018) (cf. pages 89, 91).

218. BAUER, P. *Contribution à l'étude de la détonation des mélanges explosifs gazeux à pression initiale élevée* thèse de doctorat (Université de Poitiers, 1985) (cf. pages 89, 90).
219. GEALER, R. L. & CHURCHILL, S. W. Detonation characteristics of hydrogen-oxygen mixtures at high initial pressures. *AIChE Journal* **6**, 501-505 (1960) (cf. page 89).
220. BAUER, P, BROCHET, C & KRISHNAN, S. Detonation characteristics of gaseous ethylene, oxygen, and nitrogen at high initial pressures. *Gasdynamics of detonations and explosions*, 408-422 (1981) (cf. page 90).
221. BAUER, P & BROCHET, C. Properties of detonation waves in hydrocarbon-oxygen-nitrogen mixtures at high initial pressures. *Shock waves, explosions, and detonations*(A 84-28376 12-34). New York, American Institute of Aeronautics and Astronautics, Inc., 1983, 231-243 (1983) (cf. page 90).
222. BAUER, P & BROCHET, C. The structure of the detonation front in explosive mixtures at high pressures. *Arch. Comb.* **3**, 39-45 (1983) (cf. page 90).
223. BAUER, P. A., GIRAUD, M., LEGENDRE, J.-F. & CATOIRE, L. Detonability limits of methane-oxygen mixtures at elevated initial pressures. *Propellants, Explosives, Pyrotechnics* **19**, 311-314 (1994) (cf. page 90).
224. SOAVE, G. Equilibrium constants from a modified Redlich-Kwong equation of state. *Chemical engineering science* **27**, 1197-1203 (1972) (cf. page 90).
225. MANZHALEI, V., MITROFANOV, V. & SUBBOTIN, V. Measurement of inhomogeneities of a detonation front in gas mixtures at elevated pressures. *Combustion, Explosion and Shock Waves* **10**, 89-95 (1974) (cf. page 90).
226. MACH, P. *Bifurcating Mach Shock Reflections with Application to Detonation Structure* thèse de doctorat (University of Ottawa, 2011) (cf. pages 91, 102, 105, 145).
227. MACH, P. & RADULESCU, M. I. Mach reflection bifurcations as a mechanism of cell multiplication in gaseous detonations. *Proceedings of the Combustion Institute* **33**, 2279-2285 (2011) (cf. pages 91, 105, 106, 108, 136).
228. RADULESCU, M. I., PAPI, A., QUIRK, J. J., MACH, P. & MAXWELL, B. M. *The origin of shock bifurcations in cellular detonations 22nd International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems* (2009), 4 (cf. pages 91, 103).
229. CLAVIN, P. Nonlinear analysis of shock–vortex interaction : Mach stem formation. *Journal of Fluid Mechanics* **721**, 324-339 (2013) (cf. pages 91, 103).
230. SIRIGNANO, W. A. Normal shocks with high upstream pressure. *Physical Review Fluids* **3**, 093401 (2018) (cf. page 91).

231. FAVRE, A. Equations des gaz turbulents compressibles. *Journal de Mécanique* **4**, 391 (1965) (cf. page 99).
232. HORNUNG, H. & ROBINSON, M. Transition from regular to Mach reflection of shock waves Part 2. The steady-flow criterion. *Journal of Fluid Mechanics* **123**, 155-164 (1982) (cf. page 102).
233. SHARPE, G. J. Transverse waves in numerical simulations of cellular detonations. *Journal of Fluid Mechanics* **447**, 31-51 (2001) (cf. page 103).
234. LAU-CHAPDELAINE, S. S. *Viscous triple shock reflections relevant to detonation waves, and Detonation dynamics predicted by the Fickett model* thèse de doctorat (University of Ottawa, 2019) (cf. pages 105, 106, 108).
235. LAU-CHAPDELAINE, S. S.-M. *Viscous triple shock reactions relevant to detonation waves, and Detonation dynamics predicted by the Fickett model* thèse de doctorat (University of Ottawa, Canada, 2019) (cf. page 105).
236. ANDRUS, I. Q. *A Premixed Rotating Detonation Engine : Design and Experimentation* rapport technique (AIR FORCE INSTITUTE OF TECHNOLOGY WRIGHT-PATTERSON AFB OH WRIGHT-PATTERSON . . . , 2016) (cf. page 112).
237. 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 112).
238. SHANK, J., KING, P., KARNESKY, J., SCHAUER, F. & HOKE, J. *Development and testing of a modular rotating detonation engine* 50th AIAA aerospace sciences meeting including the new horizons forum and aerospace exposition (2012), 120 (cf. page 112).
239. RACHEL, M. Operational characteristics of a rotating detonation engine using hydrogen and air. *Ohio : Wright-Patterson Air Force Base, Air Force Institute of Technology* (2011) (cf. page 112).
240. RANKIN, B. A., RICHARDSON, D. R., CASWELL, A. W., NAPLES, A., HOKE, J. & SCHAUER, F. *Imaging of OH* chemiluminescence in an optically accessible non-premixed rotating detonation engine* 53rd AIAA aerospace sciences meeting (2015), 1604 (cf. page 112).
241. YI, T.-H., TURANGAN, C., LOU, J., WOLANSKI, P. & KINDRACKI, J. *A three-dimensional numerical study of rotational detonation in an annular chamber* 47th AIAA aerospace sciences meeting including the new horizons forum and aerospace exposition (2009), 634 (cf. page 112).

242. SCHWER, D. & KAILASANATH, K. *Numerical investigation of rotating detonation engines 46th AIAA/ASME/SAE/ASEE joint propulsion conference & exhibit* (2010), 6880 (cf. page 112).
243. PAXSON, D. E. *Numerical analysis of a rotating detonation engine in the relative reference frame 52nd Aerospace Sciences Meeting* (2014), 0284 (cf. page 112).
244. SCHWER, D. A., CORRIGAN, A. T. & KAILASANATH, K. *Towards efficient, unsteady, three-dimensional rotating detonation engine simulations 52nd Aerospace Sciences Meeting* (2014), 1014 (cf. page 112).
245. COCKS, P. A., HOLLEY, A. T. & RANKIN, B. A. *High fidelity simulations of a non-premixed rotating detonation engine 54th AIAA aerospace sciences meeting* (2016), 0125 (cf. page 112).
246. NAPLES, A., HOKE, J. & SCHAUER, F. *Experimental Investigation of a Rotating Detonation Engine Injector Temporal Response 53rd AIAA aerospace sciences meeting* (2015), 1104 (cf. page 112).
247. CHO, K. Y., CODONI, J. R., RANKIN, B. A., HOKE, J. & SCHAUER, F. *High-repetition-rate chemiluminescence imaging of a rotating detonation engine 54th AIAA aerospace sciences meeting* (2016), 1648 (cf. page 112).
248. BYKOVSKII, F. & ZHDAN, S. Current status of research of continuous detonation in fuel-air mixtures. *Combustion, Explosion, and Shock Waves* **51**, 21-35 (2015) (cf. page 112).
249. REYNAUD, M., VIROT, F. & CHINNAYYA, A. *Interactions of a Detonation Wave Confined by a High-Temperature Compressible Layer 26th ICDEERS meeting, Boston, USA.* (2017), 1-6 (cf. pages 112, 121, 141).
250. CHIQUETE, C., SHORT, M. & QUIRK, J. J. The effect of curvature and confinement on gas-phase detonation cellular stability. *Proceedings of the Combustion Institute* **37**, 3565-3573 (2019) (cf. page 113).
251. RADULESCU, M. I. A detonation paradox : Why inviscid detonation simulations predict the incorrect trend for the role of instability in gaseous cellular detonations? *Combustion and Flame* (2018) (cf. pages 113, 136, 197).
252. MÉVEL, R., SABARD, J., LEI, J. & CHAUMEIX, N. Fundamental combustion properties of oxygen enriched hydrogen/air mixtures relevant to safety analysis : Experimental and simulation study. *international journal of hydrogen energy* **41**, 6905-6916 (2016) (cf. pages 113, 114, 115).

253. KIYANDA, C. B. & HIGGINS, A. J. Photographic investigation into the mechanism of combustion in irregular detonation waves. *Shock Waves* **23**, 115-130 (2012) (cf. page 117).
254. MAXWELL, B. M., BHATTACHARJEE, R. R., LAU-CHAPDELAINÉ, 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. page 117).
255. TAYLOR, B., KESSLER, D., GAMEZO, V. & ORAN, E. *The influence of chemical kinetics on the structure of hydrogen-air detonations 50th AIAA Aerospace Sciences Meeting including the New Horizons Forum and Aerospace Exposition* (2012), 979 (cf. pages 119, 121).
256. KANESHIGE, M. & SHEPHERD, J. E. Detonation database : GALCIT Report FM97-8. *California Institute of Technology* (1997) (cf. page 121).
257. TAYLOR, B., KESSLER, D. & ORAN, E. *Estimates of vibrational nonequilibrium time scales in hydrogen-air detonation waves 24th International Colloquium on the Dynamics of Explosive and Reactive Systems* (2013) (cf. page 121).
258. SHI, L., SHEN, H., ZHANG, P., ZHANG, D. & WEN, C. Assessment of vibrational non-equilibrium effect on detonation cell size. *Combustion Science and Technology* **189**, 841-853 (2017) (cf. page 121).
259. REYNAUD, M. *Numerical Study of Detonation Confined by an Inert Gas* thèse de doctorat (ISAE-ENSMA Ecole Nationale Supérieure de Mécanique et d'Aérotechnique - Poitiers, France, déc. 2017) (cf. page 121).
260. GRUNE, J., SEMPET, 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 (2017) (cf. page 129).
261. NG, H. D., JU, Y. & LEE, J. H. Assessment of detonation hazards in high-pressure hydrogen storage from chemical sensitivity analysis. *International Journal of Hydrogen Energy* **32**, 93-99 (2007) (cf. page 133).
262. LAU-CHAPDELAINÉ, S.-M. & RADULESCU, M. I. Viscous solution of the triple-shock reflection problem. *Shock Waves* **26**, 551-560 (2016) (cf. page 136).
263. LIANG, Z, BROWNE, S, DEITERDING, R & SHEPHERD, J. Detonation front structure and the competition for radicals. *Proceedings of the Combustion Institute* **31**, 2445-2453 (2007) (cf. page 137).

264. OPPENHEIM, A. K. Dynamic features of combustion. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences* **315**, 471-508 (1985) (cf. page 140).
265. WILLIAMS, D. N., BAUWENS, L. & ORAN, E. S. *Detailed structure and propagation of three-dimensional detonations Symposium (International) on Combustion* **26** (1996), 2991-2998 (cf. pages 140, 151).
266. HANANA, M. & LEFEBVRE, M. Pressure profiles in detonation cells with rectangular and diagonal structures. *Shock Waves* **11**, 77-88 (2001) (cf. pages 140, 155).
267. 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 141).
268. DEITERDING, R. *Numerical structure analysis of regular hydrogen-oxygen detonations WSSCI Fall 2003 Meeting* (University of California, Los Angeles, 2003) (cf. page 141).
269. ETO, K., TSUBOI, N. & HAYASHI, A. K. Numerical study on three-dimensional CJ detonation waves : detailed propagating mechanism and existence of OH radical. *Proceedings of the Combustion Institute* **30**, 1907-1913 (2005) (cf. page 141).
270. DELEDICQUE, V. & PAPALEXANDRIS, M. V. Computational study of three-dimensional gaseous detonation structures. *Combustion and flame* **144**, 821-837 (2006) (cf. page 141).
271. DOU, H.-S., TSAI, H. M., KHOO, B. C. & QIU, J. Simulations of detonation wave propagation in rectangular ducts using a three-dimensional WENO scheme. *Combustion and Flame* **154**, 644-659 (2008) (cf. page 141).
272. DOU, H. S. & KHOO, B. C. Effect of initial disturbance on the detonation front structure of a narrow duct. *Shock Waves* **20**, 163-173 (2010) (cf. page 141).
273. TSUBOI, N. & HAYASHI, A. K. Numerical study on spinning detonations. *Proceedings of the Combustion Institute* **31**, 2389-2396 (2007) (cf. page 141).
274. WANG, C., SHU, C.-W., HAN, W. & NING, J. High resolution WENO simulation of 3D detonation waves. *Combustion and Flame* **160**, 447-462 (2013) (cf. page 141).
275. HUANG, Y., JI, H., LIEN, F. & TANG, H. Numerical study of three-dimensional detonation structure transformations in a narrow square tube : from rectangular and diagonal modes into spinning modes. *Shock Waves* **24**, 375-392 (2014) (cf. page 141).

276. ZHU, Y., GAO, L., LUO, K. H., PAN, J., PAN, Z. & ZHANG, P. Flame evolution in shock-accelerated flow under different reactive gas mixture gradients. *Physical Review E* **100**, 013111 (2019) (cf. page 150).
277. HANANA, M., LEFEBVRE, M. & VAN TIGGELEN, P. *Gaseous and heterogeneous detonations : science to applications* (éditeurs ROY, G., FROLOV, S., KAILASANATH, K. & SMIRNOV, N.) 121-130 (ENAS, 1999) (cf. page 151).
278. HUNT, J. C., WRAY, A. A. & MOIN, P. Eddies, streams, and convergence zones in turbulent flows (1988) (cf. page 157).
279. RUBESIN, M. A one-equation model of turbulence for use with the compressible Navier-Stokes equations (1976) (cf. page 172).
280. GATSKI, T. B. & BONNET, J.-P. *Compressibility, turbulence and high speed flow* (Academic Press, 2013) (cf. page 172).
281. JAMME, S., CAZALBOU, J.-B., TORRES, F. & CHASSAING, P. Direct numerical simulation of the interaction between a shock wave and various types of isotropic turbulence. *Flow, Turbulence and Combustion* **68**, 227-268 (2002) (cf. page 172).
282. JAMME, S., CRESPO, M. & CHASSAING, P. Direct numerical simulation of the interaction between a shock wave and anisotropic turbulence, 4886 (2005) (cf. page 172).
283. DONZIS, D. A. & JAGANNATHAN, S. Fluctuations of thermodynamic variables in stationary compressible turbulence. *Journal of Fluid Mechanics* **733**, 221 (2013) (cf. page 172).
284. CAI, X., O'BRIEN, E. E. & LADEINDE, F. Thermodynamic behavior in decaying, compressible turbulence with initially dominant temperature fluctuations. *Physics of Fluids* **9**, 1754-1763 (1997) (cf. page 174).
285. LUMLEY, J. L. *Advances in applied mechanics* 123-176 (Elsevier, 1979) (cf. page 176).
286. REYNOLDS, O. IV. On the dynamical theory of incompressible viscous fluids and the determination of the criterion. *Philosophical transactions of the royal society of london.(a.)*, 123-164 (1895) (cf. page 177).
287. RAYLEIGH, J. W. S. B. *The theory of sound* (Macmillan, 1896) (cf. page 177).
288. DUROX, D., SCHULLER, T., NOIRAY, N., BIRBAUD, A.-L. & CANDEL, S. Rayleigh criterion and acoustic energy balance in unconfined self-sustained oscillating flames. *Combustion and Flame* **156**, 106-119 (2009) (cf. page 177).
289. HERNÁNDEZ, I., STAFFELBACH, G., POINSOT, T., CASADO, J. C. R. & KOK, J. B. LES and acoustic analysis of thermo-acoustic instabilities in a partially premixed model combustor. *Comptes rendus mécanique* **341**, 121-130 (2013) (cf. page 177).

290. CHU, B.-T. On the energy transfer to small disturbances in fluid flow (Part I). *Acta Mechanica* **1**, 215-234 (1965) (cf. pages 179, 181, 197).
291. NICOUD, F. & POINSOT, T. Thermoacoustic instabilities : Should the Rayleigh criterion be extended to include entropy changes? *Combustion and flame* **142**, 153-159 (2005) (cf. page 179).
292. GEORGE, K. J. & SUJITH, R. On Chu's disturbance energy. *Journal of Sound and Vibration* **330**, 5280-5291 (2011) (cf. page 179).
293. 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 182).
294. JAGANNATHAN, S. & DONZIS, D. A. Reynolds and Mach number scaling in solenoidally-forced compressible turbulence using high-resolution direct numerical simulations. *Journal of Fluid Mechanics* **789**, 669-707 (2016) (cf. page 182).
295. LEE, S., LELE, S. K. & MOIN, P. Interaction of isotropic turbulence with shock waves : effect of shock strength. *Journal of Fluid Mechanics* **340**, 225-247 (1997) (cf. page 183).
296. JIN, T., LUO, K., DAI, Q. & FAN, J. Simulations of cellular detonation interaction with turbulent flows. *AIAA Journal* **54**, 419-433 (2016) (cf. page 183).
297. MASSA, L. & LU, F. K. The role of the induction zone on the detonation-turbulence linear interaction. *Combustion Theory and Modelling* **15**, 347-371 (2011) (cf. page 184).
298. BDZIL, J. Steady-state two-dimensional detonation. *Journal of Fluid Mechanics* **108**, 195-226 (1981) (cf. page 192).
299. GAMEZO, V. N. & ORAN, E. S. Reaction-zone structure of a steady-state detonation wave in a cylindrical charge. *Combustion and flame* **109**, 253-265 (1997) (cf. page 192).
300. REYNAUD, M, TAIELB, S & CHINNAYYA, A. Two-dimensional reactive flow dynamics in cellular detonation waves. *Shock Waves* (2020) (cf. page 192).
301. 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 194).
302. TAILEB, S., MELGUIZO-GAVILANES, J. & CHINNAYYA, A. Influence of the chemical modeling on the quenching limits of gaseous detonation waves confined by an inert layer. *Combustion and Flame* **218**, 247-259 (2020) (cf. page 197).

-
303. JOHNSTON, I. A. *The Noble-Abel equation of state : Thermodynamic derivations for ballistics modelling* rapport technique (Defence Science et Technology Organisation Edinburgh (Australia) Weapons . . ., 2005) (cf. page [217](#)).
304. LIPKOWICZ, J., WLOKAS, I & KEMPF, A. Analysis of mild ignition in a shock tube using a highly resolved 3D-LES and high-order shock-capturing schemes. *Shock Waves* **29**, 511-521 (2019) (cf. page [226](#)).

Résumé

La présente étude s'inscrit dans le cadre général des simulations numériques des détonations dans des conditions non-idéales. Les configurations abordées correspondent à des écoulements rencontrés dans les accidents industriels ainsi que dans les moteurs à détonation rotative, dans lequel le combustible est injecté à des pressions élevées dans un milieu confiné par des gaz inertes. Les simulations conduites reposent sur un code de simulation numérique RESIDENT (REcycling mesh SIMulation of DETonations) développé à l'Institut Pprime. Il s'appuie sur des schémas numériques d'ordre élevé adaptés à la capture des chocs, avec un schéma d'interpolation MP d'ordre 9, un solveur HLLC-M et une intégration temporelle de Runge-Kutta d'ordre 3. Dans un premier temps, l'influence des équations d'état (EOS) sur la structure cellulaire de la détonation a été étudiée avec les deux EOS : gaz parfaits et Noble-Abel. Les résultats ont montré que l'interaction d'une ligne de glissement avec un ensemble de points triples est responsable de la création d'un nouveau point triple. L'augmentation du coefficient isentropique post-choc inhibe l'apparition de ces instabilités et régularise la structure cellulaire. Ce résultat tire son importance du fait que la structure cellulaire conditionne les règles empiriques de dimensionnement. Dans un second temps, l'influence de la modélisation de la cinétique chimique sur la structure de la détonation et ses limites d'extinction a été étudiée à l'aide de trois schémas cinétiques de complexité croissante : chimie à une étape globale, à trois étapes et chimie détaillée. Malgré les similitudes sur la dynamique du front et sur la structure cellulaire, les résultats présentent des différences significatives lorsque la détonation est soumise à des pertes latérales par un confinement par gaz inerte. Cette étude met en évidence l'impact du modèle cinétique sur la prédiction des limites d'extinction des détonations observées expérimentalement. Finalement, l'influence des effets tridimensionnels sur la dynamique de la détonation a été étudiée. Des comparaisons de simulations 2-D et 3-D ont été effectuées dans le cas d'une configuration d'une détonation marginale et d'une détonation semi-confinée. Malgré les différences dans la topologie de l'écoulement, des similitudes ont été observées dans la structure moyenne lorsque la détonation est idéale. L'analyse de l'énergie des fluctuations totale a révélé que les fluctuations d'entropie sont plus importantes que les fluctuations totales de pression. Dans le cas de la détonation semi-confinée, les effets 3-D se manifestent par un déficit de vitesse moindre qu'en 2-D lorsque la détonation se propage à la même hauteur réactive. Le déficit de vitesse est alors corrélé au rapport de l'épaisseur hydrodynamique avec le rayon de courbure, malgré une courbure moyenne plus importante du front en 3-D.

Mots Clés : Simulation par ordinateur / Ondes de détonation / Instabilités hydrodynamiques / Hautes pressions / Moteurs à détonation / Cinétique chimique

Abstract

This study is part of the general framework of numerical simulations of detonations under non-ideal conditions. The configurations discussed correspond to flows encountered in industrial hazards and rotating detonation engines. Simulations are based on an inhouse code RESIDENT (REcycling mesh SIMulation of DETonations) developed at the Pprime Institute. It is based on high-order shock capturing schemes, with a MP9 interpolation scheme, a HLLC-M solver and a 3rd Runge-Kutta time integration. At first, the influence of the equation of state (EOS) on the cellular detonation structure has been studied with two EOS : Perfect gas and Noble-Abel. The numerical results have shown that new triples points are generated from the interaction of a slip line with already existing triple points. The increase of the post-shock isentropic coefficient has inhibited the appearance of these instabilities and has regularized the cell structure. This results may be important as engineering correlations are based on the cell size and regularity. Secondly, the influence of chemical modelling on the structure of the detonation and its extinction limits were studied using three kinetic models of increasing complexity : single-step, three-step chain-branching and detailed chemistry. Despite the macroscopic features are similar, the outcome of the critical height of a detonation confined by an inert layer is significantly different, highlighting the impact of the kinetics in predicting the extinction limits observed in experiments. Finally, the influence of three-dimensional effects on the dynamics of detonation was studied. Comparisons of 2-D and 3-D simulations are carried out in the case of marginal and semi-confined detonations. Despite the differences observed in the flow topology, similarities were found in the mean structure when the detonation propagation is ideal. The analysis of the total fluctuation energy revealed that entropy fluctuations are more important than pressure fluctuations. In the case of semi-confined detonation, 3-D effects manifests a smaller velocity deficit than in 2-D when the detonation propagates at the same reactive height. The velocity deficit is correlated to the ratio of the hydrodynamic thickness to the radius of curvature, despite the higher average curvature of the 3-D front.

Key words : Numerical simulation / Detonation waves / Hydrodynamic instabilities / High pressure (Science) / Detonation engines / Chemical kinetics