



**HAL**  
open science

# Aspects tridimensionnels de la détonation cellulaire : des observations expérimentales et un modèle

Vianney Monnier

## ► To cite this version:

Vianney Monnier. Aspects tridimensionnels de la détonation cellulaire : des observations expérimentales et un modèle. Autre. ISAE-ENSMA Ecole Nationale Supérieure de Mécanique et d'Aérotechnique - Poitiers, 2023. Français. NNT : 2023ESMA0008 . tel-04282708

**HAL Id: tel-04282708**

**<https://theses.hal.science/tel-04282708>**

Submitted on 13 Nov 2023

**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 MODIFIÉ PAR L'ARRÊTÉ DU 26 AOÛT 2022)

ÉCOLE DOCTORALE : MATHÉMATIQUES, INFORMATIQUE, MATÉRIAUX, MÉCANIQUE, ÉNERGÉTIQUE

SECTEUR DE RECHERCHE : ÉNERGÉTIQUE, THERMIQUE, COMBUSTION

PRÉSENTÉE PAR :

**VIANNEY MONNIER**

---

### ASPECTS TRIDIMENSIONNELS DE LA DÉTONATION CELLULAIRE : DES OBSERVATIONS EXPÉRIMENTALES ET UN MODÈLE

---

Directeur de thèse : **PIERRE VIDAL**

Co-encadrants de thèse : **VINCENT RODRIGUEZ ET RATIBA ZITOUN**

MANUSCRIT DÉFINITIF

SOUTENUE LE 28 SEPTEMBRE 2023

DEVANT LA COMMISSION D'EXAMEN

**JURY :**

PRÉSIDENTE

**SVETLANA STARIKOVSKAIA** DIRECTRICE DE RECHERCHE CNRS - LPP

RAPPORTEURS

**THIERRY POINSOT** DIRECTEUR DE RECHERCHE CNRS - IMFT  
**MARK SHORT** RESEARCH SCIENTIST LOS ALAMOS NATIONAL LABORATORY

EXAMINATEURS

**GEORGES JOURDAN** PROFESSEUR DES UNIVERSITÉS AIX-MARSEILLE UNIVERSITÉ - IUSTI  
**BRUNO DENET** PROFESSEUR DES UNIVERSITÉS AIX-MARSEILLE UNIVERSITÉ - IRPHE

ENCADRANTS

**PIERRE VIDAL** CHARGÉ DE RECHERCHE CNRS - INSTITUT P'  
**VINCENT RODRIGUEZ** MAÎTRE DE CONFÉRENCES ISAE ENSMA - INSTITUT P'  
**RATIBA ZITOUN** MAÎTRESSE DE CONFÉRENCES UNIVERSITÉ DE POITIERS - INSTITUT P'





# Abstract

The mean width and the regularity of the cellular structures of detonation fronts in gases are important parameters of detonation dynamics. This width is often considered as a similarity parameter and constitutes a criterion of relative detonability useful for presizing applicative devices, such as rotating detonation engines or mitigation systems. However, the phenomenological analysis of detonation cells remains a fundamental problem in the dynamics of reactive compressible fluids, experimentally, numerically and theoretically.

Our study focuses on three sets of dynamic behaviours of cell detonation depending on the shape - square or round - of the section of the detonation tube. These are the geometric properties of its cells in straight and wide tubes, the non-monotonic dynamics of its expansion in a tube of moderately increasing cross-section and its re-ignition after diffraction by an obstacle. We made recordings on soot-coated plates and by high-speed shadowgraph or chemiluminescence cinematography.

The front views show cells that become irregular as their number increases, even though they are initially regular. However, their parietal recordings can remain regular, depending on the mixture. In our conditions, the limiting cell widths reached at the largest cross-section areas are smaller in the tubes with constant area than with increasing cross-sections for the same cross-section area. The mechanisms after diffraction by an obstacle are very different, depending on its open-area ratio and the shape of the tube cross-section. The re-ignition distances are smaller with the square cross-section.

That indicates a persistent influence of the cross-section shape and edge effects at large dimensions in steady situations and at long times in transient unsteady situations. These effects modify all the cell descriptors, *i.e.* its aspect ratio, mean width, regularity and the shape of its front view.

We propose the notion of a self-contained cell structure for sufficiently large numbers of cells. In these situations, the dynamics of a cell is determined only by its interaction with its neighbours. The characteristic time of the cell beat is very small compared with the time it takes a transverse wave to travel through the tube cross-section. Therefore, the local fluctuations in the flow dynamics on the scale of the cell beating time dominate the forced dynamics that could be imposed on the transverse waves by a square or rectangular section of the tube, depending on the mixture and its initial pressure. Local disturbances act faster than global dynamics.

We have developed a model that accurately predicts the mean width based on the principle that the cellular and theoretical processes have the same mass combustion rate, relative to their respective - but different - combustion times, so that each gives the same mean detonation velocity. Under the assumptions that the stochastic motion of the transverse waves is stationary ergodic and the cellular process adiabatic, its ingredients are then graph theory, geometric probabilities and the Zeldovich-von Neuman-Döring model of detonation. We emphasise that non-adiabatic cellular mechanisms produce cells that are too irregular for the average of their widths to have any physical meaning.

These results emphasize the three-dimensional nature of the local and global dynamic behaviour of detonations. From a modelling point of view, they place new constraints on qualitative and quantitative predictions of numerical simulations. From an application point of view, their sensitivity and complexity suggest undertaking design and production studies at a technological readiness level sufficiently close to the conditions imposed by operational equipment.

**Key words :** Chemiluminescence, Combustion, Compressibility, Fluid dynamics, Hydrogen, Detonation waves, Oxygen, Cellular structure, Ergodic theory

# Résumé

La largeur moyenne et la régularité des structures cellulaires des fronts de détonations dans les gaz sont des paramètres importants en dynamique des détonations. Cette largeur est souvent considérée comme un paramètre de similitude et constitue un critère de détonabilité relative utile pour pré-dimensionner des systèmes applicatifs, comme le moteur à détonation rotative, ou des systèmes de mitigation. L'analyse phénoménologique des cellules de détonation reste toutefois un problème fondamental de la dynamique des fluides compressibles réactifs, tant expérimental que numérique et théorique.

Notre étude porte sur trois ensembles de comportements dynamiques de la détonation cellulaire selon la forme - carrée ou ronde - de la section du tube à détonation. Ce sont les propriétés géométriques de ses cellules en tube droit et large, la dynamique non-monotone de son expansion en tube de section modérément croissante et son ré-amorçage après diffraction par un obstacle. Nous avons réalisé des enregistrements sur plaques à dépôt de carbone et par cinématographie ultra-rapide avec ombroscopie ou chimiluminescence.

Les vues de face montrent des cellules qui deviennent irrégulières à mesure que leur nombre augmente, même si elles sont initialement régulières. Cependant, leurs enregistrements pariétaux peuvent rester réguliers, selon le mélange. Dans nos conditions, les largeurs limites de cellules aux plus grandes sections sont plus petites en tube de section constante que croissante, pour une même aire de section. Les mécanismes après diffraction par un obstacle sont très différents, selon son rapport d'ouverture et la forme de la section du tube. Les distances de ré-amorçage sont plus petites en section carrée.

Ceci indique une influence persistante de la forme de la section et des effets de bords aux grandes dimensions en situation stationnaire et aux temps longs en situations instationnaires transitoires. Ces effets modifient tous les descripteurs de la cellule, soit son rapport d'aspect, sa largeur moyenne, sa régularité et la forme de sa vue de face.

Nous proposons la notion de structure cellulaire auto-confinée pour les cellules en nombre suffisamment grand. Dans ces situations, la dynamique d'une cellule n'est déterminée que par son interaction avec ses voisines. Le temps caractéristique de battement cellulaire est alors très petit devant celui du parcours de la section du tube par une onde transverse. Ainsi, les fluctuations locales de la dynamique de l'écoulement à l'échelle du temps de battement cellulaire dominent la dynamique forcée que pourrait imposer aux ondes transverses une section carrée ou rectangulaire du tube, selon le mélange et sa pression initiale. Les perturbations locales agissent plus vite que la dynamique globale.

Nous avons développé un modèle qui prédit précisément la largeur moyenne à partir du principe que les processus cellulaire et théorique ont le même taux de combustion massique, relativement à leurs temps de combustion respectifs - différents l'un de l'autre -, pour que chacun donne la même célérité moyenne de détonation. Sous les hypothèses d'un mouvement stochastique des ondes transverses ergodique stationnaire et d'un processus cellulaire adiabatique, ses ingrédients sont alors la théorie des graphes, les probabilités géométriques et le modèle Zeldovich-von Neuman-Döring de détonation. Nous soulignons que les mécanismes cellulaires non-adiabatiques produisent des cellules trop irrégulières pour que la moyenne de leurs largeurs ait un sens physique.

Ces résultats soulignent le caractère tridimensionnel des comportements dynamiques locaux et globaux des détonations. Du point de vue des modélisations, ils posent de nouvelles contraintes de prédictions qualitatives et quantitatives aux simulations numériques. Du point de vue applicatif, leurs sensibilité et complexité amènent à conseiller de continuer à aborder les études de conception et de réalisation à un niveau de maturité technologique suffisamment proche des conditions imposées par l'équipement opérationnel.

**Mots clés :** Chimiluminescence, Combustion, Compressibilité, Combustion, Dynamique des fluides, Hydrogène, Ondes de détonation, Structure cellulaire, Théorie ergodique



*La force d'un penseur n'est ni dans son approbation  
ni dans sa protestation, mon bon ami, elle est dans l'explication.*

L'Espoir, ANDRÉ MALRAUX (1937)





# Remerciements

Cette thèse ne serait pas ce qu'elle est sans le concours de celles et ceux qui m'ont aidé professionnellement comme personnellement.

Je tiens tout d'abord à remercier mon équipe de direction, PIERRE VIDAL, VINCENT RODRIGUEZ et RATIBA ZITOUN. Je mesure ma chance d'avoir été accompagné par vous. Vous m'avez appris à devenir chercheur et expliqué les différents rouages du monde académique. Vous m'avez fait confiance pour gagner en autonomie, et permis d'apporter ma petite contribution à la création de savoirs. Merci pour cette formation enrichissante, mais également pour la préparation de l'après-thèse, pour vos précieux conseils, pour m'avoir fait part de vos expériences et de vos réflexions.

Je remercie Mme SVETLANA STARIKOVSKAIA et MM. THIERRY POINSOT, MARK SHORT, GEORGES JOURDAN et BRUNO DENET d'avoir accepté de juger ce travail et de leurs retours.

Je remercie M. KARL JOULAIN, directeur de l'institut P', de m'avoir accueilli dans son établissement.

Un grand merci, ALAIN CLAVERIE, pour ton aide précieuse dans les campagnes expérimentales, grâce à laquelle nous avons pu obtenir de belles vidéos. Merci pour les moments de rires au laboratoire comme en réunion, et surtout bravo pour m'avoir motivé à courir dans les rues de Poitiers.

Merci, MARIE-CANNELLE EYSSERIC, pour ton aide précieuse dans mes démarches administratives et ta bonne humeur.

Les expériences de cette thèse ont été rendues possibles grâce à l'équipe technique de l'institut P'. En particulier, à NICOLAS PAPIN pour tes méthodes et mises en plans, discussions sur la vie des ateliers et sur la douceur angevine. À BASTIEN ROBERT, pour tes idées à base de composites et ton humour. À JEAN-CHRISTOPHE JOUVANNEAU et REDOUANE KARI, pour la rapidité de la mise en œuvre de vos solutions. À JACQUES BAILLARGEAT, pour tes anecdotes et pour m'avoir appris à couper le quartz. Merci à HALIMA DEGAEY pour les échanges amicaux et d'avoir permis de travailler dans de bonnes conditions. Enfin, à YANN THOMAS et BENOÎT CARME, pour votre pédagogie et pour m'avoir permis de garder un pied dans l'univers des machines-outils.

J'ai également une pensée pour les doctorantes, doctorants, chercheuses et chercheurs avec qui j'ai pu partager le quotidien : entre pauses, coups de main et conférences. En particulier, mes pensées vont à CAMILLE COTTENOT, ÉTIENNE CHOPARD, VICTOR LAFAURIE, CORENTIN LOISEAU, THOMAS CANTEGRIL, CÉLIA SOUDARIN, MARINE BEAUCOUESTE, ALEXANDRE WEPPE, JOSUÉ MELGUIZO-GAVILANES, SHEM LAU-CHAPDELAINÉ, XIAO-CHENG MI, MAKSYM SLOBODENIUK, YVES BALLOSSIER, STANISŁAW SIATKOWSKI, MHEDINE ALI CHÉRIF, KARL CHATELAIN, ALESSANDRA MATINO, CRISTIAN MEJIA BOTERO, PIERRE HELLARD, LÉA VILASI, TITOUAN FESSARD, BIXENTE BERROUET et ZAKARIA BAZHAR.

J'ai également bénéficié d'un grand soutien de mes parents BRIGITTE et JEAN-PHILIPPE depuis le début de ma scolarité, dont ils voient enfin le bout. Merci à vous de m'avoir transmis votre curiosité, votre ouverture d'esprit, et par dessus tout votre goût de l'enseignement, raisons premières de mon inscription en doctorat.

Ma gratitude va également à vous, les camarades de la AN217 et valeurs ajoutées. Je vous suis reconnaissant pour votre proximité malgré les kilomètres qui nous séparent, que vous soyez à Montréal ou Malmö, sur la terre ferme ou entre deux îles. Merci pour vos rires, vos encouragements, vos attentions et votre soutien. Merci pour les moments de complicité, de confiance, de découvertes et de prises de recul. Je sais à quel point votre complicité est précieuse.

Je tiens enfin à te remercier particulièrement, ANNE-SOLÈNE CARON, d'être dans ma vie et de m'accompagner au quotidien. Tu m'as offert des moments de paix, levé mes doutes et mes remises en question et soutenu avec patience et force. Merci pour ton rayonnement.

# Table des matières

<b>Table des matières</b>	<b>ii</b>
<b>Liste des figures</b>	<b>vii</b>
<b>Liste des tables</b>	<b>viii</b>
<b>Nomenclature</b>	<b>ix</b>
<b>1 Introduction</b>	<b>3</b>
1.1 Histoire de la détonation . . . . .	5
1.2 La détonation, entre applications et risques . . . . .	6
1.3 Motivations et structure du mémoire . . . . .	7
<b>2 Les représentations de la détonation</b>	<b>9</b>
2.1 Lois de bilan . . . . .	10
2.2 La détonation comme une discontinuité totalement réactive . . . . .	17
2.3 Modèle ZND . . . . .	21
2.4 Détonations cellulaires . . . . .	24
<b>3 Techniques et méthodologies expérimentales</b>	<b>31</b>
3.1 Tubes à détonation . . . . .	32
3.2 Obstacle de diffraction . . . . .	35
3.3 Caractérisation des fronts de détonation . . . . .	36
3.4 Amorçage de la détonation . . . . .	38
3.5 Prémélanges réactifs . . . . .	38
<b>4 Résultats expérimentaux et leurs analyses</b>	<b>39</b>
4.1 Propagation de la détonation en tube droit . . . . .	40
4.2 Propagation de la détonation en tube de section croissante . . . . .	58
4.3 Diffraction et ré-amorçage de la détonation à travers un orifice . . . . .	67
4.4 Conclusion sur l'influence de la géométrie du confinement . . . . .	83

---

<b>5</b>	<b>Modèle prédictif d'une largeur représentative de cellule</b>	<b>85</b>
5.1	Approches antérieures . . . . .	86
5.2	Équivalence des processus cellulaires et ZND . . . . .	90
5.3	Description statistique des cellules de détonation . . . . .	95
5.4	Largeurs de cellules calculées et mesurées . . . . .	101
5.5	Discussion du modèle . . . . .	109
<b>6</b>	<b>Conclusion</b>	<b>113</b>
<b>A</b>	<b>Contributions scientifiques</b>	<b>119</b>
<b>B</b>	<b>Concours La preuve par l'image 2023</b>	<b>121</b>
	<b>Bibliographie</b>	<b>141</b>

# Liste des figures

2.1	Représentation dans le plan $(p, v)$ des polaires d'Hugoniot ( $\mathcal{H}$ ), des droites de Rayleigh-Michelson ( $\mathcal{RM}$ ). Le point 0 correspond à l'état initial pré-choc, les points N aux états choqués par une discontinuité inerte de vitesse $D$ , les points S, CJ et W correspondent aux solutions forte, de Chapman-Jouguet et faible, pour une discontinuité totalement réactive. . . . .	15
2.2	Solution de Taylor-Zel'dovich de l'écoulement des gaz brûlés dans un tube à fond fermé et immobile en $x = 0$ . . . . .	18
2.3	Schéma de la détonation ZND et notations. Profil jaune : profil qualitatif de température $T$ . . . . .	21
2.4	Cellules de détonation par traces sur dépôts de carbone. Gauche : chemins suivis longitudinalement par les bords des cellules. Droite : instantané de face des cellules. Mélange : $2\text{H}_2 + \text{O}_2$ à $p_0 = 15$ kPa. Tube à section carrée $40 \times 40$ mm <sup>2</sup> . . . . .	24
2.5	Schémas de modes marginaux de détonation à une onde transverse en tube rond (gauche) et rectangulaire (droite) . . . . .	24
2.6	Schéma d'une coupe longitudinale de la structure cellulaire de la détonation. Gauche : structure régulière, droite : structure très irrégulière. . . . .	25
2.7	Schémas de classification des structures cellulaires par LIBOUTON et VAN TIGGELEN [87]. De gauche à droite : structure très régulière, régulière, irrégulière, très irrégulière. . . . .	27
3.1	Schématisation du tube rond de section 16 cm <sup>2</sup> en configuration "propagation simple". A : allumage, S : spirale de Shchelkin, P : capteur de pression piézoélectrique, L : plaque à dépôt de carbone longitudinale, F : plaque à dépôt de carbone frontale. . . . .	33
3.2	Schéma du tronçon divergent en fin de tube de propagation. A : allumage, S : spirale de Shchelkin, P <sub>n</sub> : capteur de pression piézoélectrique, L : plaque à dépôt de carbone . . . . .	33
3.3	Position des capteurs de pression sur les brides de fond des tronçons de sections croissantes . . . . .	34
3.4	Tube carré de section 16 cm <sup>2</sup> pour l'étude section 4.3. A : allumage, S : spirale de Shchelkin, P : capteur de pression piézoélectrique, O : obstacle, L : plaque à dépôt de carbone ou hublot de quartz, R : paille de fer . . . . .	35
3.5	Principe de l'ombroscopie. SL : Source ponctuelle de lumière, M : Miroir concave, C : Lentille convergente, D : Diaphragme, C' : Lentille de collection, HPVX-2 : Caméra ultra-rapide. . . . .	37
4.1	Enregistrements frontaux et longitudinaux sur dépôt de carbone de la structure cellulaire de détonations dans les prémélanges $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 2\text{Ar}$ dans les tubes carré, rond et triangulaire de $16 \pm 4\%$ cm <sup>2</sup> . . . . .	41

4.2	Enregistrements frontaux et longitudinaux sur dépôt de carbone de structures cellulaires de détonations dans le prémélange $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 2\text{Ar}$ à $p_0 = 70$ kPa dans les tubes R, C et R'. . . . .	45
4.3	Enregistrements frontaux et longitudinaux sur dépôt de carbone de structures cellulaires de détonations dans le prémélange $2\text{H}_2 + \text{O}_2$ dans les tubes C et R. . . . .	46
4.4	Enregistrements frontaux et longitudinaux sur dépôt de carbone de structures cellulaires de détonations dans le prémélange $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 2\text{Ar}$ à $p_0 = 15$ kPa dans les tubes carré, triangulaire et rond de $16\text{ cm}^2$ . . . . .	47
4.5	Enregistrements frontaux et longitudinaux sur dépôt de carbone de structures cellulaires de détonations dans le prémélange $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 2\text{Ar}$ à $p_0 = 17,5$ kPa dans les tubes carré, triangulaire et rond de $16\text{ cm}^2$ . . . . .	48
4.6	Enregistrements frontaux et longitudinaux sur dépôt de carbone de structures cellulaires de détonations dans le prémélange $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 2\text{Ar}$ à $p_0 = 20$ kPa dans les tubes carré, triangulaire et rond de $16\text{ cm}^2$ . . . . .	49
4.7	Enregistrements frontaux et longitudinaux sur dépôt de carbone de structures cellulaires de détonations dans le prémélange $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 2\text{Ar}$ à $p_0 = 22,5$ kPa dans les tubes carré, triangulaire et rond de $16\text{ cm}^2$ . . . . .	50
4.8	Distribution des tailles de cellule normalisées $\lambda/\bar{\lambda}_C$ mesurées dans les tubes R (rouge) et C (bleu) selon la dilution à l'argon et $p_0$ . $N_C$ et $N_R$ : nombre de cellules mesurées. Les bandes bornées par les traits pointillés contiennent 68,2% des cellules. . . . .	51
4.9	Moyennes $\bar{\lambda}_C$ des largeurs de cellules de détonation dans les prémélanges $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 2\text{Ar}$ (haut) et de $2\text{H}_2 + \text{O}_2$ (bas) mesurées sur les enregistrements longitudinaux dans différents tubes, en fonction de la pression initiale $p_0$ et de la section de tube. . . . .	52
4.10	Vitesses moyennes de détonation $\bar{D}$ dans les tubes rond ( $\circ$ ) et carré ( $\square$ ) de section $16\text{ cm}^2$ en fonction de $p_0$ et de la dilution à l'argon. Les barres d'erreurs sont estimées à 115 m/s [132]. Les pointillés indiquent les vitesses CJ. . . . .	53
4.11	Agrandissement d'un croisement d'ondes transverses démontrant l'absence de points quadruples. . . . .	54
4.12	Gauche : vue en coupe et de face du dépôt de carbone avant et après impact de l'onde de détonation. Droite : enregistrement frontal avec les directions des ondes transverses à l'instant d'impact. ( $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 2\text{Ar}$ , $p_0 = 15,0$ kPa)	55
4.13	Schéma de la structure d'une détonation marginale de $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 2\text{Ar}$ en tube carré à déphasage arbitraire $0 < \varphi < \varphi_{\max}$ . . . . .	56
4.14	Schémas de la structure cellulaire d'une détonation marginale en tube carré à déphasage nul ( $\varphi = 0$ ) et maximal ( $\varphi = \varphi_{\max}$ ). . . . .	57
4.15	Exemple de l'évolution du déphasage sur un enregistrement longitudinal de détonation dans $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 2\text{Ar}$ à $p_0 = 20$ kPa. . . . .	57
4.16	Enregistrements longitudinaux et frontaux des structures cellulaires dans les tronçons de section croissante rond (gauche) et carré (droite). Mélange $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 2\text{Ar}$ à $p_0 = 20$ kPa. . . . .	61

4.17	Comparaison des enregistrements frontaux d'une détonation $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 2\text{Ar}$ à $p_0 = 20\text{ kPa}$ dans un tube de section constante $25\text{ cm}^2$ (gauche) et de section croissante à $24\text{ cm}^2$ (droite). . . . .	62
4.18	Largeur $\lambda$ des cellules dans les tronçons divergents en fonction de l'aire adimensionnée de la section $A/A_0$ . Les courbes délimitent les zones contenant 68,2% des mesures. Les symboles verts représentent les valeurs moyennes pour les tubes R' ( $71\text{ cm}^2$ ) et C' ( $25\text{ cm}^2$ ), de section constante. Les barres d'erreur représentent l'écart-type des largeurs $\lambda$ . Les symboles noirs représentent la moyenne locale $\bar{\lambda}_C$ des valeurs $\lambda$ . . . . .	63
4.19	Disparition progressive des impacts (en rouge) des ondes transverses normales à la paroi dans le tronçon divergent carré. . . . .	65
4.20	Schéma des obstacles utilisés pour l'étude. . . . .	68
4.21	Diffraction de l'onde de choc et découplage de l'onde de combustion après passage de l'obstacle d'ouverture RO=10% d'une détonation dans $2\text{H}_2 + \text{O}_2$ à $p_0 = 60\text{ kPa}$ (Superposition d'images de chimiluminescence colorisée et d'ombroscopie, $f_{\text{caméra}} = 250\text{ kHz}$ ). . . . .	70
4.22	Comportement après passage à travers l'obstacle d'ouverture RO=25% d'une détonation dans $2\text{H}_2 + \text{O}_2$ à $p_0 = 15\text{ kPa}$ . Images 1 à 7 : ombroscopie, image du bas : enregistrement sur dépôt de carbone. $\Delta t_{\text{images}} = 6,5\ \mu\text{s}$ . Section du tube : $40 \times 40\text{ mm}^2$ . . . . .	74
4.23	Comportement après passage à travers l'obstacle d'ouverture RO=25% d'une détonation de $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 2\text{Ar}$ à $p_0 = 12,5\text{ kPa}$ (ombroscopie). $\Delta t_{\text{images}} = 8,5\ \mu\text{s}$ . Section du tube : $40 \times 40\text{ mm}^2$ . . . . .	75
4.24	Comportement après passage à travers l'obstacle d'ouverture RO=25% d'une détonation de $2\text{H}_2 + \text{O}_2$ à $p_0 = 30\text{ kPa}$ . Superposition d'images de chimiluminescence colorisée et d'ombroscopie (1 à 5) et enregistrement sur dépôt de carbone (bas). $\Delta t_{\text{images}} = 3\ \mu\text{s}$ . Section du tube : $40 \times 40\text{ mm}^2$ . . . . .	76
4.25	Comportement après passage à travers l'obstacle d'ouverture RO=50% d'une détonation de $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 2\text{Ar}$ à $p_0 = 15\text{ kPa}$ . Ombroscopie (1 à 7) et enregistrement sur dépôt de carbone (bas). $\Delta t_{\text{images}} = 6,0\ \mu\text{s}$ . Section du tube : $40 \times 40\text{ mm}^2$ . . . . .	77
4.26	Enregistrements sur dépôt de carbone de ré-amorçages par interaction de chocs dans les coins du tube carré. Haut : $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 2\text{Ar}$ , $p_0 = 80\text{ kPa}$ , RO= 10%, pas de déflagration. Bas : $2\text{H}_2 + \text{O}_2$ , $p_0 = 70\text{ kPa}$ , RO= 25%, déflagration en centre de paroi. Jaune : détonation très surcomprimée, cellules à peine visibles. Orange : détonation surcomprimée, cellules grandissantes. Rouge : détonation surcomprimée. Bleu : déflagration. . . . .	78
4.27	Comportement après passage à travers l'obstacle d'ouverture RO=25% d'une détonation de $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 2\text{Ar}$ à $p_0 = 70\text{ kPa}$ . Superposition d'images de chimiluminescence colorisée et d'ombroscopie (1 à 5) et enregistrement sur dépôt de carbone (bas). $\Delta t_{\text{images}} = 4\ \mu\text{s}$ . Section du tube : $40 \times 40\text{ mm}^2$ . . . . .	79
4.28	Superposition d'images de chimiluminescence colorisée et d'ombroscopie et enregistrement sur dépôt de carbone d'une détonation de $2\text{H}_2 + \text{O}_2$ à $p_0 = 50\text{ kPa}$ après diffraction à travers l'orifice d'ouverture RO= 75%. $\Delta t_{\text{images}} = 3\ \mu\text{s}$ . Section du tube : $40 \times 40\text{ mm}^2$ . . . . .	80



4.29	Scénarios en fonction du rapport d'ouverture RO et de la section de tube (ronde : gris foncé, carrée : gris clair). (×) pas de ré-amorçage, (□) ré-amorçage choc-choc au centre du tube, (■) ré-amorçage choc-choc en coin de tube, (◈) ré-amorçage choc-paroi, (▽) ré-amorçage par TDD, (●) transmission. . . . .	81
4.30	Enregistrements sur dépôt de carbone des différents scénarios observés dans les tubes rond et carré avec un obstacle d'ouverture RO= 25%. (a) pas de ré-amorçage, (b) ré-amorçage en TDD, (c) ré-amorçage par interaction de chocs en centre de tube, (d) ré-amorçage par interaction de chocs en coin, (e) ré-amorçage par interaction choc-paroi. . . . .	82
5.1	Profils ZND de thermicité et de température typiques illustrant les diverses définitions des longueurs d'induction et épaisseurs de réaction. . . . .	88
5.2	Gauche : processus ZND. Droite : processus cellulaire adiabatique limite . . .	91
5.3	Profil ZND (gauche) et évolution matérielle (droite) de la température $T$ (courbes rouges, coordonnées à droite) et de la distance des ondes transverses moyenne $\lambda_1$ and $\lambda_2$ (courbes bleue et verte, coordonnées à gauche). L'intersection de $\lambda_1$ et $\lambda_2$ donne la largeur moyenne de cellule $\bar{\lambda}_C$ et les longueur $\bar{\ell}_Z$ et temps $\bar{t}_Z$ ZND caractéristiques. . . . .	94
5.4	Empilement hexagonal compact (la symétrie de la cellule statistiquement représentative rend l'empilement CFC non-physique). . . . .	97
5.5	Enregistrements frontaux d'une structure cellulaire. Gauche : enregistrement expérimental d'une détonation de $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 2\text{Ar}$ à $p_0 = 30\text{ kPa}$ dans le tube rond R. Milieu : schéma d'un graphe représentant un front de détonation où les couleurs représentent des valeurs aléatoires de $y(t)$ au moment de l'enregistrement. Droite : pavage statistiquement équivalent, et où la valeur moyenne $\bar{y}$ est représentée par sa couleur. . . . .	98
5.6	Combustible $\text{H}_2$ . Comparaison entre valeurs mesurées et calculées de $\bar{\lambda}_C$ pour les schémas cinétiques de KONNOV [169], (◆), de SAN DIEGO [170] (●) et de FFCM-1 [171] (▲). Croix : mesures en tube large ( $d_t/\bar{\lambda}_C \geq \mathcal{O}(10)$ , +) et mince ( $d_t/\bar{\lambda}_C \leq \mathcal{O}(10)$ , ×). . . . .	103
5.7	Combustibles hydrocarburés. Comparaison entre valeurs mesurées et calculées de $\bar{\lambda}_C$ pour les schémas cinétiques de KONNOV [169], (◆), de SAN DIEGO [170] (●) et de FFCM-1 [171] (▲). Croix : mesures en tube large ( $d_t/\bar{\lambda}_C \geq \mathcal{O}(10)$ , +) et mince ( $d_t/\bar{\lambda}_C \leq \mathcal{O}(10)$ , ×). . . . .	104
5.8	Sensibilité des évolutions de température ZND ( $T$ , courbes rouges, coordonnées à droite), des distances d'ondes transverses ( $\lambda_1$ et $\lambda_2$ , courbes bleues et vertes, coordonnées à gauche), de la largeur moyenne de cellule $\bar{\lambda}_C$ et de la durée de réaction totale $\bar{t}_Z$ aux schémas cinétiques de KONNOV (courbes pleines) et de SAN DIEGO (courbes pointillées). Les courbes vertes sont confondues. . . . .	106
5.9	Sensibilité des évolutions de température (gauche) ZND ( $T$ , courbes rouges, coordonnées à droite), des distances d'ondes transverses ( $\lambda_1$ et $\lambda_2$ , courbes bleues et vertes, coordonnées à gauche), de la largeur moyenne de cellule $\bar{\lambda}_C$ et de la durée de réaction totale $\bar{t}_Z$ aux schémas cinétiques de KONNOV (courbes pleines) et FFCM-1 (courbes pointillées). Les courbes vertes sont confondues. . . . .	106

---

5.10	Profils ZND de température $T$ (courbes rouges, coordonnées à droite) et distances transverses moyennes $\lambda_1$ et $\lambda_2$ (courbes bleue et verte, coordonnées à gauche) d'après le schéma cinétique de KONNOV. . . . .	107
B.1	Tête-à-tête avec une détonation . . . . .	121

# Liste des tableaux

3.1	Dimensions des tubes de détonation . . . . .	32
4.1	Temps de déclenchement en $\mu\text{s}$ des capteurs piézoélectriques ( $P_n$ ) référencés à celui du capteur ( $P_1$ ) (figure 3.2) en fonction de leurs positions relatives à l'axe du tronçon . . . . .	66
4.2	Vitesses moyennes de propagation dans les tubes droits et divergents. L'incertitude est de 115 m/s [132] . . . . .	66
5.1	Compatibilité des combustibles et des schémas cinétiques . . . . .	101
5.2	Dimensions transverses des tubes expérimentaux . . . . .	102
5.3	Exemples de résultats du calcul avec le schéma de KONNOV [169] (figure 5.3)	108
5.4	Proportion des formes en fonction du nombre de côtés $A$ pour un processus aléatoire de Poisson stationnaire et homogène [189, 190]. . . . .	110

# Nomenclature

---

## Sigles, acronymes et indices

0	État initial
1-, 2-, 3D	Mono-, Bi-, Tri-dimensionnel(le)
C	Carré
CJ	Chapman-Jouguet
N	Conditions au choc
RM	Rayleigh-Michelson
R	Rond
RO	Rapport d'ouverture
ZND	Zel'dovich-von Neuman-Döring
m	Indice désignant une particule

## Symboles grecs

$\alpha$	Angle	rad ou °
$\gamma$	Indice adiabatique	
$\delta$	Épaisseur	m
$\varepsilon$	Rugosité	m
$\lambda$	Distance entre les ondes transverses	m
$\bar{\lambda}_C$	Largeur de cellule de détonation représentative	m
$\mu$	Incrément molaire	mol
$\nu$	Fraction volumique brûlée	
$\xi$	Variable de similitude	
$\rho$	Masse volumique	kg/m <sup>3</sup>
$\varsigma$	Coefficient de thermicité	
$\dot{\sigma}$	Thermicité	1/s
$\phi$	Richesse	
$\chi$	Nombre d'irrégularité	
$\omega$	Taux de réaction	1/s

## Symboles latins

$A$	Aire	$\text{m}^2$
$a$	Côté de section carrée	$\text{m}$
$c$	Célérité du son	$\text{m/s}$
$c_p$	Capacité calorifique massique à pression constante	$\text{J}/(\text{K} \cdot \text{kg})$
$c_v$	Capacité calorifique massique à volume constant	$\text{J}/(\text{K} \cdot \text{kg})$
$D$	Célérité de discontinuité	$\text{m/s}$
$d$	Dimension transverse ou diamètre	$\text{m}$
$E_a$	Énergie d'activation de réaction globale	$\text{J/mol}$
$e$	Énergie massique	$\text{J/kg}$
$f$	Fréquence	$\text{Hz}$
$h$	Enthalpie massique	$\text{J/kg}$
$I$	Invariant de Riemann	$\text{m/s}$
$L$	Position du choc dans le référentiel du laboratoire	$\text{m}$
$\bar{L}_C$	Longueur représentative de cellule	$\text{m}$
$\bar{\ell}_Z$	Longueur représentative de réaction ZND complète	$\text{m}$
$\bar{\ell}_{ZI}$	Épaisseur représentative d'induction ZND	$\text{m}$
$\delta\bar{\ell}_{ZR}$	Épaisseur représentative de réaction ZND	$\text{m}$
$\mathcal{M}$	Masse molaire	$\text{kg/mol}$
$M$	Masse	$\text{kg}$
$Ma$	Nombre de Mach	
$n$	Quantité de matière	$\text{mol}$
$p$	Pression	$\text{kPa}$
$Q_{p0}$	Chaleur massique de réaction à pression constante	$\text{J/kg}$
$Q_{v0}$	Chaleur massique de réaction à volume constant	$\text{J/kg}$
$R$	Constante des gaz parfaits	$\text{J/kg/mol}$
$R_C$	Rayon de courbure	$\text{m}$
$s$	Entropie massique	$\text{J}/(\text{K} \cdot \text{kg})$
$T$	Température	$\text{K}$
$t$	Temps	$\text{s}$
$t_m$	Temps matériel depuis le choc ZND	$\text{s}$
$\bar{t}_C$	Temps caractéristique pour une longueur de cellule	$\text{s}$
$\bar{t}_Z$	Temps de réaction ZND complète	$\text{s}$
$\bar{t}_{ZI}$	Temps d'induction ZND	$\text{s}$
$\delta\bar{t}_{ZR}$	Durée de réaction ZND	$\text{s}$
$U$	Vitesse matérielle dans le référentiel du choc	$\text{m/s}$
$u$	Vitesse matérielle dans le référentiel du laboratoire	$\text{m/s}$
$v$	Volume massique	$\text{m}^3/\text{kg}$
$x$	Distance ou position dans le référentiel du laboratoire	$\text{m}$
$y$	Fraction massique	
$z$	Position dans le référentiel du choc	$\text{m}$





# Introduction

---

La déflagration et la détonation sont les deux types de propagation d'ondes de combustion dans les pré-mélanges réactifs. Une déflagration se propage en auto-accélération à des vitesses subsoniques par rapport à l'état initial. Dans les gaz, les surpressions générées sont faibles,  $\mathcal{O}(10^{-2})$  bar au plus, et ces vitesses n'excèdent pas  $\mathcal{O}(100)$  m/s. À partir de ces valeurs, la pré-compression du mélange frais, due à l'effet de piston de la flamme subsonique, peut induire une transition brusque vers la détonation. La réaction chimique pour la déflagration est assurée par des phénomènes de transports conductifs et diffusifs d'énergie et de masse. Une détonation se propage à des vitesses supersoniques par rapport à l'état initial. Un choc déclenche la réaction chimique par compression adiabatique. Selon la composition, la pression et la température initiales des gaz, les valeurs typiques des vitesses de propagation sont comprises entre 1,5 et 3 km/s et celle des rapports de pression entre 20 et 40.

L'apparition accidentelle, le développement de la propagation et la maîtrise de ces phénomènes sont très sensibles aux conditions initiales (pression, température et composition du gaz, mode d'amorçage, *etc.*) et aux limites (taille des dispositifs, nature et état de surface des parois, *etc.*). La conception de systèmes opérationnels, c'est-à-dire fiables et sécurisés, pouvant impliquer accidentellement, occasionnellement ou intentionnellement des détonations, requiert donc des expériences sur des dispositifs de niveau de maturité technologique suffisant. Le coût de leur mise au point est donc très élevé en particulier en raison de leur élaboration technologique et de la combinaison de nombreux phénomènes (*e.g.*, compressibilité, cinétique chimique, turbulence, transferts thermiques). La simulation numérique constitue donc un outil de conception nécessaire. Elle reste toutefois limitée par les capacités de calcul requises par le caractère tridimensionnel des dynamiques locales et globales des détonations et, dans un objectif quantitatif, par la complexité des équations d'état et mécanismes de cinétique chimique réalistes.

Ainsi, l'instabilité de la zone de réaction de la détonation conduit à une structure cellulaire tridimensionnelle qui signe expérimentalement le régime de détonation. Les propriétés géométriques des cellules, comme leur largeur moyenne et leur régularité, sont



déterminées par le couplage entre la dynamique d'écoulement et la cinétique chimique du gaz selon les pressions, températures et compositions initiales du gaz. Elles sont un indicateur de la détonabilité au sens de la capacité de la détonation à se propager facilement. Cette détonabilité est d'autant plus grande que la largeur moyenne des cellules est petite devant les dimensions transversales du confinement. La caractérisation de ces cellules constitue donc un enjeu important du point de vue applicatif mais soulève de nombreuses difficultés fondamentales, tant expérimentales que numériques et théoriques.

Les phénomènes canoniques qui constituent les briques élémentaires des observations en situation opérationnelle sont, eux, plus accessibles, en particulier aux laboratoires académiques. Cette thèse présente des observations expérimentales d'aspects dynamiques tridimensionnels de la structure cellulaire en propagation stationnaire ou instationnaire ou des comportements transitoires comme les ré-amorçages en aval d'un obstacle. Elles démontrent la nécessité de calibrer les simulations sur de tels aspects tridimensionnels. Elle propose aussi un modèle prédictif d'une taille représentative des cellules de détonation.

## 1.1 Histoire de la détonation

Les études rationnelles des déflagrations et des détonations voient le jour au XIX<sup>e</sup> siècle. Elles sont essentiellement associées à l'industrialisation de la production d'explosifs condensés à vocation militaire (propulsion des projectiles) et minière (séparation de pans de roche) et aux accidents dans les mines de charbon. Elles sont toutefois précédées de nombreuses observations d'explosions non-identifiées à l'un ou l'autre de ces modes de propagation. LEIBER [1] mentionne ainsi celle, spectaculaire, ayant détruit partiellement en 1687 le Parthénon d'Athènes qui servait alors d'entrepôt de poudre noire. L'historique de référence sur la progression des études sur les détonations reste celui de MANSON [2, 3].

C'est dans ce contexte industriel qu'en 1869 ABEL [4] distingue rationnellement la détonation de la déflagration selon le mode d'amorçage. Cette terminologie est attestée dès la fin du XVII<sup>e</sup> siècle, mais sans critère scientifique [5]. ROUX et SARRAU [6], pour leur part, rapportent en 1873 deux types d'explosions qualifiés de "1<sup>er</sup>" et de "2<sup>nd</sup> ordre", respectivement la détonation et la déflagration.

Ce sont les accidents miniers qui ont motivé les études des explosions des pré-mélanges gazeux. Dans les mines, un ensemble de gaz combustibles composé majoritairement de méthane et appelé grisou se forme naturellement. L'explosion résultant de sa combustion accidentelle est appelée "coup de grisou". Elle peut provoquer l'effondrement des galeries et la mort de centaines de mineurs [7]. La lampe mise au point par DAVY [8] en 1815 constitue l'une des premières propositions de prévention (*cf.* [9] et références incluses). En 1877, le gouvernement français [10] commissionne MALLARD et LE CHATELIER pour étudier la propagation des explosions dans les mélanges gazeux. Ces derniers mettent en évidence l'existence de deux mécanismes de combustion dans les pré-mélanges gazeux en 1881 [11]. BERTHELOT et VIEILLE [12, 13] ont rapproché ces mécanismes dans les gaz à ceux rapportés par ROUX et SARRAU dans les explosifs condensés [6].

## 1.2 La détonation, entre applications et risques

Les systèmes actuels de propulsion aéronautique utilisent le régime de déflagration subsonique quasi-isobare. Un compresseur est donc nécessaire et impute un coût énergétique pour son fonctionnement et son embarquement. Le temps de réaction d'une déflagration impose une dimension minimum à la chambre de combustion et freine la miniaturisation des moteurs. La pré-compression du mélange réactif par une onde de choc constitue donc une alternative intéressante du point de vue de la masse embarquée et du rendement global du moteur. Il existe deux architectures de moteurs utilisant le régime de détonation : le moteur à détonation pulsée (PDE : *Pulsed Detonation Engine*) et le moteur à détonation rotative (RDE : *Rotating Detonation Engine*). Le premier est constitué d'un tube semi-ouvert et fonctionne en trois temps : admission, détonation, éjection. Le second consiste en général en une chambre annulaire semi-ouverte. L'admission se fait en continu sur l'extrémité fermée de la chambre. La détonation brûle les gaz frais en décrivant un mouvement circulaire à distance constante de l'admission des gaz frais. Dans les deux architectures, les gaz brûlés sont éjectés par l'extrémité ouverte de la chambre, générant une poussée [14].

En industrie, la détonation d'un explosif permet une mise en oeuvre simple et bien adaptée aux petites séries pour déformer des pièces minces monoblocs dont les grandes dimensions imposeraient une presse démesurée, ou pour obtenir des tubes localement emboutis, dont les contre-formes ne permettent pas d'utiliser une matrice [15]. Les études récentes [16] suggèrent de remplacer les explosifs condensés de ce procédé par des pré-mélanges gazeux réactifs.

L'une des solutions proposées à la demande croissante d'énergie bas-carbone est la production d'électricité d'origine nucléaire [17]. Cependant, les centrales de production encourent des risques d'accidents, tel que celui de Three Mile Island [18] liés à une production incontrôlée d'hydrogène qui, s'il se mélange avec l'oxygène présent dans l'air, forme un mélange potentiellement explosif [19, 20].

## 1.3 Motivations et structure du mémoire

La zone de réaction des détonations est instable. Les détonations présentent donc une structure cellulaire qui est leur signature expérimentale. La caractérisation de cette structure a fait l'objet de nombreux travaux du fait de son intérêt pour prédire la propagation ou non de détonations dans des appareils industriels ou propulsifs, ainsi que pour la calibration de la cinétique chimique. À ce jour, cette caractérisation se fait sur la base de la largeur des cellules et de leur régularité, obtenues expérimentalement aux parois de tubes droits. La structure cellulaire est fondamentalement tridimensionnelle.

La structure cellulaire est une manifestation des non-linéarités et des instabilités des écoulements compressibles réactifs [21]. HIGGINS [22], NG et ZHANG [23], VASIL'EV [24], et DESBORDES et PRESLES [25] ont passé en revue les progrès expérimentaux et numériques sur l'instabilité de la détonation et les cellules. La compréhension et la caractérisation de cette instabilité sont utiles pour étudier la cinétique chimique dans les zones de réaction de la détonation, pour calibrer les simulations numériques et pour le dimensionnement d'équipements industriels sûrs et de nouveaux systèmes de propulsion [26-28].

La caractérisation des détonations se base sur des longueurs représentatives de comportements dynamiques canoniques. Ce sont, par exemple, la largeur moyenne des cellules, le diamètre critique de transmission dans un grand volume [29], la demi-longueur de réaction (chapitre 2, [22]) ou la longueur effective de la zone de réaction, *i.e.* l'épaisseur hydrodynamique introduite par SOLOUKHIN [30] et étudiée par LEE [31] et RADULESCU [32].

Ce travail a pour motivation de décrire les propriétés tridimensionnelles de la structure cellulaire de la détonation. Le chapitre 2 dresse un état de l'Art de la détonation tridimensionnelle. Le chapitre 3 décrit les bancs expérimentaux. Le chapitre 4 présente les résultats obtenus. Le chapitre 5 propose un modèle prédictif d'une largeur représentative de cellule. Le chapitre 6 résume et discute le travail, et suggère d'autres études.



# Les représentations de la détonation

---

## Sommaire

---

<b>2.1 Lois de bilan</b>	<b>10</b>
2.1.1 Écoulements compressibles du fluide parfait	10
2.1.2 Discontinuités fortes	13
<b>2.2 La détonation comme une discontinuité totalement réactive</b>	<b>17</b>
2.2.1 Autonomie d'une discontinuité	17
2.2.2 Détonation Chapman-Jouguet	19
<b>2.3 Modèle ZND</b>	<b>21</b>
<b>2.4 Détonations cellulaires</b>	<b>24</b>
2.4.1 Cellule de détonation	25
2.4.2 Largeur de cellule	26
2.4.3 Régularité de la structure et stabilité du mélange	26
2.4.4 Structure cellulaire et confinement	28

---

On doit à RANKINE [33], HUGONOT [34], MICHELSON [35], VIEILLE [36], CRUSSARD [37], CHAPMAN [38] et JOUGUET [39] les premiers éléments de formalisations nécessaires à l'analyse des ondes de discontinuité. ZEL'DOVICH [40] soulignera l'importance de l'analyse de la détonation plane postulée comme une discontinuité totalement réactive à état final sonique à l'équilibre chimique par JOUGUET. TAYLOR [41] et ZEL'DOVICH [42] ont plus tard décrit l'écoulement instationnaire des produits derrière cette détonation. VIEILLE [36] serait le premier à donner, en 1900, une description qualitative de structure de détonation comme une discontinuité de type choc inerte amorçant une zone de réaction. Entre 1938 et 1945 ZEL'DOVICH, VON NEUMAN et DÖRING (ZND) décriront quantitativement cette dernière comme unidimensionnelle plane stationnaire. Il faut attendre 1959 pour que DENISOV et TROSHIN [43] mettent en évidence expérimentalement sa structuration tridimensionnelle cellulaire instationnaire, dont la zone de réaction ZND est vue aujourd'hui comme la moyenne.

## 2.1 Lois de bilan

### 2.1.1 Écoulements compressibles du fluide parfait

La rapidité du processus de combustion dans les zones de réaction de détonations permettent en général de considérer que le fluide réactif y est parfait, c'est à dire non visqueux et non conducteur de chaleur. Les écoulements compressibles du fluide parfait sont donc adiabatiques. Leur dynamique est alors régie par les équations d'Euler pour les bilans de masse (2.1) et de quantité de mouvement (2.2) et par l'expression du premier principe de la thermodynamique (2.3) pour le bilan d'énergie. Les formes fonctionnelles de l'équation d'état (2.4) et des taux de réactions chimiques (2.5) permettent de constituer le système fermé d'équations

$$\frac{dv}{dt} - v \operatorname{div}(\mathbf{u}) = 0, \quad (2.1)$$

$$\frac{d\mathbf{u}}{dt} + v \nabla p = 0, \quad (2.2)$$

$$\frac{de}{dt} + p \frac{dv}{dt} = 0, \quad (2.3)$$

$$e = e(p, v, \mathbf{y}), \quad (2.4)$$

$$\frac{d\mathbf{y}}{dt} = \boldsymbol{\omega}(p, v, \mathbf{y}), \quad (2.5)$$

où  $t$  désigne le temps,  $\mathbf{u}$  le vecteur vitesse matérielle dans le référentiel du laboratoire,  $p$  la pression,  $v$  et  $e$  le volume et l'énergie interne massiques,  $\mathbf{y} = (y_k)$ ,  $k \in [1, K]$  le vecteur des fractions massiques  $y_k$  des  $K$  espèces chimiques et  $dg/dt = \partial g/\partial t + \mathbf{u} \cdot \nabla g$  la dérivée matérielle d'une quantité  $g$ . Le vecteur  $\boldsymbol{\omega} = (\omega_k = dy_k/dt)$  représente les taux de réaction indépendants ( $\sum_{k=1}^K y_k = 1$ ). Les équations (2.3 - 2.5) constituent un système de  $5 + K$  équations à  $5 + K$  inconnues. La combinaison du premier principe et de l'équation d'état (2.4) permet de réécrire le bilan d'énergie (2.3) comme

$$\frac{dp}{dt} + \left(\frac{c}{v}\right)^2 \frac{dv}{dt} = \rho c^2 \dot{\sigma}, \quad (2.6)$$

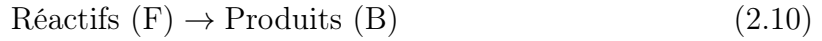
$$c^2 = v^2 \frac{p + (\partial e/\partial v)_{p, \mathbf{y}}}{(\partial e/\partial p)_{v, \mathbf{y}}} \equiv \gamma p v, \quad (2.7)$$

$$\dot{\sigma} = \boldsymbol{\varsigma} \cdot \boldsymbol{\omega}, \quad (2.8)$$

$$\boldsymbol{\varsigma} = (\varsigma_k), \quad \varsigma_k = -\frac{(\partial e/\partial y_k)_{p, v, y_{j \neq k}}}{(\partial e/\partial p)_{v, \mathbf{y}}}, \quad (2.9)$$

où  $c$  est la vitesse du son,  $\gamma = c^2/(pv)$  l'indice adiabatique,  $\dot{\sigma}$  la thermicité et  $\boldsymbol{\varsigma}$  le vecteur des coefficients de thermicité  $\varsigma_k$ .

Le modèle minimal classique pour une présentation synthétique des bases d'analyse des détonations s'appuie sur une simplification des lois de comportements (2.4) et (2.5), soit un mélange à deux composants, les réactifs (gaz frais, indice F) et les produits (gaz brûlé, indice B), liés par la réaction globale de transformation chimique :



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

$$\omega = \frac{dy}{dt} = A \left( \frac{\rho}{\rho_*} \right)^n (1 - y)^m e^{-\frac{E_a}{RT}} \quad (2.11)$$

où  $\rho = 1/v$  est la masse volumique du mélange et  $T$  sa température.  $A$  est une constante homogène à l'inverse d'un temps,  $\rho_*$  une masse volumique de référence,  $n$  et  $m$  des nombres sans dimension,  $E_a$  l'énergie d'activation de la réaction globale (2.10) et  $R = 8.314$  J/K/mol la constante universelle des gaz. La variable d'avancement de la réaction est ici la fraction massique des produits  $y = M_B/M$ , avec  $M = M_F(t) + M_B(t)$  la masse du mélange et  $M_F(t)$  et  $M_B(t)$  celles des gaz frais et brûlés. Cette représentation de la cinétique chimique avec une réaction globale a été la base des premières études numériques des instabilités 1D et 2D des zones de réaction des détonations puis de leur structuration cellulaire, *e.g.* [44-46]. Son utilité aujourd'hui est essentiellement pédagogique car elle ne permet pas une représentation suffisamment réaliste des profils ZND de réaction (section 2.3), en particulier un réglage indépendant de la longueur d'induction et de l'épaisseur de réaction, élément fondamental pour l'étude de la taille moyenne et de la régularité des cellules de détonations [24].

Si l'on suppose que ces deux gaz sont chacun parfaits et en équilibres thermique et mécanique :

$$T = \mathcal{M} \frac{pv}{R} \quad (2.12)$$

$$\frac{1}{\mathcal{M}} = \frac{1 - y}{\mathcal{M}_F} + \frac{y}{\mathcal{M}_B} \quad (2.13)$$

où  $\mathcal{M}$  est la masse molaire du mélange,  $\mathcal{M}_F$  et  $\mathcal{M}_B$  celles des réactifs et des produits.

Si l'on suppose de plus que les deux gaz sont idéaux, leurs capacités calorifiques massiques à pression ( $c_{pF}, c_{pB}$ ) et volume ( $c_{vF}, c_{vB}$ ) constants sont indépendantes de l'état thermodynamique, soit ici de la température. L'additivité des volumes, énergies et entropies ( $v = \sum_{k=1}^K y_k v_k$ ,  $e = \sum_{k=1}^K y_k e_k$  et  $s = \sum_{k=1}^K y_k s_k$ ) et l'intégration des différentielles thermodynamiques  $de_F = c_{vF} dT$  et  $de_B = c_{vB} dT$  définit alors l'équation d'état (2.4) du



mélange par :

$$e(T,y) = e_0 + c_v(T - T_0) - yQ_{v0}, \quad (2.14)$$

$$c_v(y) = yc_{vB} + (1 - y)c_{vF}, \quad (2.15)$$

$$e(p,v,y) = e_0 + \frac{pv - (1 + \mu)p_0v_0}{\gamma - 1} - yQ_{v0}, \quad (2.16)$$

ou, avec l'enthalpie massique  $h = e + pv$ , par :

$$h(T,y) = h_0 + c_p(T - T_0) - yQ_{p0} \quad (2.17)$$

$$c_p(y) = yc_{pB} + (1 - y)c_{pF} \quad (2.18)$$

$$h(p,v,y) = h_0 + \frac{\gamma(pv - (1 + \mu)p_0v_0)}{\gamma - 1} - yQ_{p0}. \quad (2.19)$$

L'indice 0 désigne l'état initial du mélange à la température  $T_0$  et à la pression  $p_0$ , non nécessairement l'état thermodynamique conventionnel de référence 273 K et 1 atm. Les quantités  $c_p$  et  $c_v$  sont les capacités calorifiques massiques du mélange,  $\gamma(y) = c_p/c_v$  leur rapport,  $\mu$  l'incrément molaire de la réaction complète,

$$\gamma = \frac{(1 - y)c_{pF} + yc_{pB}}{(1 - y)c_{vF} + yc_{vB}} = \frac{(1 - y)\frac{\gamma_F}{\gamma_F - 1} + y(1 + \mu)\frac{\gamma_B}{\gamma_B - 1}}{(1 - y)\frac{1}{\gamma_F - 1} + y(1 + \mu)\frac{1}{\gamma_B - 1}}, \quad (2.20)$$

$$\mu = \frac{\mathcal{M}_F}{\mathcal{M}_B} - 1 = \frac{n_B}{n_F} - 1, \quad (2.21)$$

où  $\gamma_F = c_{pF}/c_{vF}$ ,  $\gamma_B = c_{pB}/c_{vB}$  et  $n_B$  et  $n_F$  désignent les quantités de matière initiale des réactifs et finale des produits. Les quantités  $Q_{p0}$  et  $Q_{v0}$  sont les chaleurs massiques de réaction à pression et volume constants, *i.e.* la différence d'énergie interne (respectivement enthalpie) massique des gaz frais et brûlés à température et pression initiales  $T_0$  et  $p_0$ . Elles sont liées par  $Q_{v0} = Q_{p0} + \mu p_0 v_0$ .

Si on néglige  $\mu$  et la dépendance sur  $y$  de  $\gamma$ , la définition (2.9) et l'équation d'état (2.17) montrent pour la réaction globale (2.11) que le coefficient de thermicité est

$$\varsigma = (\gamma - 1)Q_0/c^2 \quad (2.22)$$

où  $Q_0 = Q_{p0} = Q_{v0}$  dans le cadre de l'approximation ci-dessus.

Des mécanismes simplifiés plus avancés sont utilisés dans le cadre d'études numériques, par exemple celui à 3 étapes de CLAVIN et DENET [47].

### 2.1.2 Discontinuités fortes

Le système des équations (2.1), (2.2) et (2.3) admet des solutions continues par morceaux dont les séparations peuvent être de trois types :

- surface de glissement : continuité de pression et de direction de la vitesse matérielle.
- surface de discontinuité faible : continuité des variables, saut des dérivées. De telles surfaces sont en général les fronts d'ondes de détente. Elles sont nécessairement soniques.
- surface de discontinuité forte : sauts des variables et des dérivées. Les lois de bilan (2.1, 2.2 et 2.3) mènent alors aux contraintes

$$\rho_1 (D - u_1) = \rho_0 (D - u_0) \quad (2.23)$$

$$p_1 + \rho_1 (D - u_1)^2 = p_0 + \rho_0 (D - u_0)^2 \quad (2.24)$$

$$e_1 + \frac{p_1}{\rho_1} + \frac{1}{2} (D - u_1)^2 = e_0 + \frac{p_0}{\rho_0} + \frac{1}{2} (D - u_0)^2 \quad (2.25)$$

aussi appelées relations de saut ou relations de Rankine-Hugoniot. Les indices 0 et 1 désignent les états immédiatement devant et derrière la discontinuité. Les quantités  $D$ ,  $u_0$  et  $u_1$  sont les composantes normales à la surface de la discontinuité de la célérité et des vitesses matérielles. Les composantes tangentielles de ces dernières sont continues. Nous ne considérons dans cette étude que les situations où l'état initial du gaz est au repos,  $u_0 = 0$ . Ces relations s'appliquent en tout point de la surface de discontinuité, qu'elle soit plane ou courbe, de célérité constante ou variable.

On appelle choc la discontinuité forte. On considère ici qu'à travers celle-ci, la composition chimique est invariante, soit  $\mathbf{y}_0 = \mathbf{y}_1$ , d'où, pour le gaz idéal à deux composants (2.10),  $y_0 = y_1 = 0$ . Le modèle le plus simple de détonation, par exemple celui dit Chapman-Jouguet (section 2.2) est la discontinuité forte à travers laquelle la composition atteint l'équilibre chimique, soit  $\mathbf{y}_0 \neq \mathbf{y}_1$ , et, pour le gaz idéal à deux composants (2.10),  $y_0 = 0$  et  $y_1 = 1$ .

Les relations de Rankine-Hugoniot complétées par les équations d'état du fluide et les compositions chimiques devant et derrière la discontinuité ne forment pas un système fermé. Celui-ci comprend 4 équations (2.23-2.25 et 2.4) pour les 5 inconnues  $\rho_1$ ,  $p_1$ ,  $D$ ,  $u_1$  et  $e_1$ , étant donné les compositions initiale et finale du fluide  $\mathbf{y}_0$  et  $\mathbf{y}_1$ , et sa solution sera donc à un paramètre. Sa fermeture requiert une relation supplémentaire devant exprimer le lien de causalité entre l'état 1 immédiatement derrière la discontinuité, et les conditions génératrices de l'écoulement derrière celle-ci. Dans l'absolu, aucune information sur la

dynamique d'une discontinuité ne peut obéir à une condition de causalité locale. Elle ne peut être obtenue que par résolution conjointe de l'écoulement. Cette causalité, c'est à dire cette impossibilité de détermination locale, est équivalente à la condition supersonique-subsonique, (*e.g.* [48-50]) :

$$u_1 + c_1 > D > u_0 + c_0. \quad (2.26)$$

Elle exprime que toute perturbation acoustique de même direction de propagation que celle de la discontinuité, dans l'écoulement arrière, la rattrape et influence sa dynamique, alors que la discontinuité ne perturbe pas l'état initial. On peut montrer son équivalence avec les conditions d'évolution assurant l'augmentation de l'entropie à travers la discontinuité, soit  $s_1 > s_0$ . Ces conditions impliquent les propriétés physiques du fluide dans le domaine thermodynamique où l'on souhaite que la discontinuité évolue [48]. La plupart des fluides les satisfont. Néanmoins, l'approximation dite de WHITHAM [51-54] (GSD, *Geometrical Shock Dynamics*), qui s'appuie sur les travaux de MOECKEL, CHESTER et CHISNELL [55], permet d'obtenir une équation différentielle liant la célérité, la courbure et l'accélération d'un choc divergent dont l'intégration permet d'en suivre la position. Elle consiste à observer que, compte tenu des valeurs habituelles de l'index adiabatique  $\gamma \gtrsim 1$ , et pour des détente longitudinales pas trop prononcées, les dérivées selon la trajectoire du choc peuvent être substituées à celles selon les trajectoires acoustiques dans la relation de compatibilité le long de ces trajectoires acoustiques (relation caractéristique). La position et la forme du choc sont alors données par l'intégration d'une équation différentielle de type "télégraphiste".

Les solutions à un paramètre du système d'équation (2.23-2.25 et 2.4) peuvent être représentées sous forme d'intersections de courbes dans le plan  $(p,v)$ , soit  $(\mathcal{RM})$  et  $(\mathcal{H})$ , figure 2.1. En éliminant la vitesse matérielle  $u_1$  entre les bilans de masse (2.23) et de quantité de mouvement (2.24), on obtient d'abord les droites de Rayleigh-Michelson  $(\mathcal{RM})$  :

$$p_1 = p_{\mathcal{RM}}(v_1, p_0, v_0) = p_0 + \left(\frac{D}{v_0}\right)^2 (v_0 - v_1). \quad (2.27)$$

Puis, en éliminant  $u_1$  et  $D$  du bilan d'énergie (2.25) avec les bilans de masse (2.23) et de quantité de mouvement (2.14) on obtient la relation d'Hugoniot

$$e_1(v_1, p_0, v_0) = e_0 + \frac{1}{2} (p_1 + p_0) (v_0 - v_1), \quad (2.28)$$

qui, après élimination du saut d'énergie avec l'équation d'état (2.4), donne les polaires d'Hugoniot  $(\mathcal{H})$  :

$$p_1 = p_{\mathcal{H}}(v_1, p_0, v_0). \quad (2.29)$$

Pour le gaz idéal (2.4) inerte ( $Q_{p0} = 0$ ), et en négligeant  $\mu$ , elles s'écrivent

$$p_1(v_1, p_0, v_0) = p_0 \left( 1 + \frac{2\gamma_F}{\gamma_F + 1} \cdot \frac{1 - \frac{v_1}{v_0}}{\frac{v_1}{v_0} - \frac{\gamma_F - 1}{\gamma_F + 1}} \right). \quad (2.30)$$

Dans ce plan  $(p, v)$ , le paramètre de la solution est la célérité  $D$  de la discontinuité.

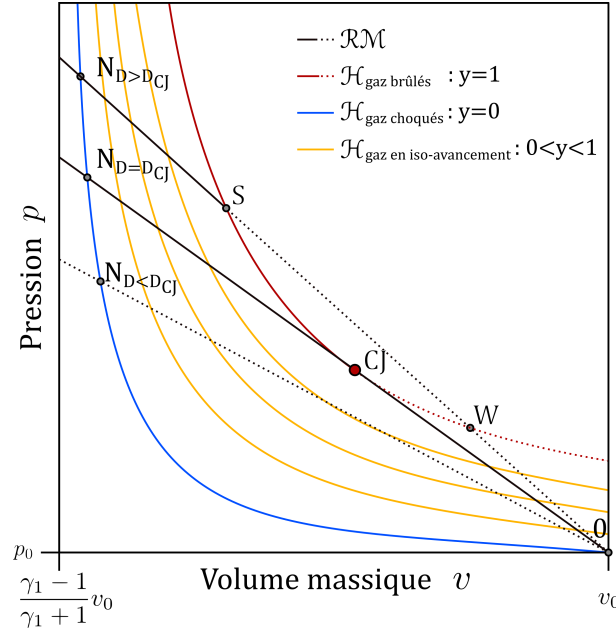


FIGURE 2.1 – Représentation dans le plan  $(p, v)$  des polaires d'Hugoniot ( $\mathcal{H}$ ), des droites de Rayleigh-Michelson ( $\mathcal{RM}$ ). Le point 0 correspond à l'état initial pré-choc, les points N aux états choqués par une discontinuité inerte de vitesse  $D$ , les points S, CJ et W correspondent aux solutions forte, de Chapman-Jouguet et faible, pour une discontinuité totalement réactive.

Il n'y a qu'une solution N (par référence à VON NEUMANN) quelle que soit  $D$  ou bien la pente  $-(D/v_0)^2$  de la droite ( $\mathcal{RM}$ ). Elle s'écrit :

$$\frac{v_0 p_N}{D^2} \simeq \frac{u_N}{D} \simeq \frac{2}{\gamma_0 + 1}, \quad \frac{v_N}{v_0} \simeq \frac{\gamma_0 - 1}{\gamma_0 + 1} \left( 1 + \frac{2M_{a0}^{-2}}{\gamma_0 - 1} \right) \quad (2.31)$$

$$\frac{RT_N}{MD^2} \simeq 2 \frac{\gamma_0 - 1}{(\gamma_0 + 1)^2} \left( 1 + \frac{2M_{a0}^{-2}}{\gamma_0 - 1} \right), \quad M_{a0} = \frac{D}{c_0} \quad (2.32)$$

Pour le gaz idéal (2.4) réactif ( $Q_{p0} \neq 0$ ), la polaire d'Hugoniot ne passe plus par son pôle  $(p_0, v_0)$ , ce que montre l'exemple ci-après du gaz idéal avec la présence de la chaleur de réaction  $Q_{p0}$  au numérateur de la polaire d'Hugoniot, par comparaison avec (2.30)

$$p_1(v_1, p_0, v_0) = p_0 \left( 1 + \frac{2\gamma_B}{\gamma_B + 1} \cdot \frac{1 - \frac{v_1}{v_0} + \frac{(\gamma_B + 1)Q_{p0}}{p_0 v_0}}{\frac{v_1}{v_0} - \frac{\gamma_B - 1}{\gamma_B + 1}} \right). \quad (2.33)$$

aussi appelée courbe de Crussard pour une discontinuité totalement réactive ( $y_1 = 1$ ).

Il peut donc y avoir, selon la valeur de  $D$ , zéro, une ou deux solutions. On note  $D_{\text{CJ}}$  la valeur particulière de  $D$  pour laquelle la droite ( $\mathcal{RM}$ ) est tangente à la courbe d'Hugoniot de la discontinuité totalement réactive ( $\mathcal{H}$ ).  $D_{\text{CJ}}$  est le groupement (section 2.2)

$$D_{\text{CJ}} = D_* \left( \frac{1}{2} + \frac{\gamma_B}{\gamma_F} \left( \frac{c_0}{D_*} \right)^2 + \frac{1}{2} \sqrt{1 + 4 \frac{\gamma_B}{\gamma_F} \left( \frac{c_0}{D_*} \right)^2} \right) \quad (2.34)$$

$$D_*^2 = 2(\gamma_B^2 - 1)Q_{p0}, \quad c_0^2 = \gamma_F p_0 v_0 \quad (2.35)$$

- Pour  $D < D_{\text{CJ}}$ , il n'y a pas d'intersection de ( $\mathcal{RM}$ ) et ( $\mathcal{H}$ ) et donc pas de solution.
- Pour  $D > D_{\text{CJ}}$ , il y a deux intersections de ( $\mathcal{RM}$ ) et ( $\mathcal{H}$ ) et donc deux solutions, l'une S (pour *Strong*) forte, subsonique ( $u_1 + c_1 > D$ ), l'autre W (pour *Weak*) faible, supersonique ( $D > u_1 + c_1$ ). Seule la solution S, subsonique, est physique (*supra*, (2.26)) :

$$\frac{v_0 p_S}{D^2} \simeq \frac{u_S}{D} \simeq \frac{1 + \Delta(D)}{\gamma_1 + 1}, \quad \frac{v_S}{v_0} \simeq \frac{\gamma_1 - \Delta(D)}{\gamma_1 + 1}, \quad \Delta(D) = \sqrt{1 - \left( \frac{D_{\text{CJ}}}{D} \right)^2} \quad (2.36)$$

où  $D/D_{\text{CJ}}$  est le degré de force de la détonation. Pour des degrés de force infinis ( $D_{\text{CJ}}/D \rightarrow 0$ ), ou en l'absence de chaleur de réaction ( $Q_{p0} = 0$ ), on aura donc  $\Delta = 1$  et on retrouve la solution N du cas inerte (2.31, 2.32). En effet, les polaires d'Hugoniot non-réactive (2.30) et totalement réactive (2.33) ont la même asymptote  $v_{\text{lim}}/v_0 = (\gamma_1 - 1)/(\gamma_1 + 1)$  qui représente la valeur minimale du rapport de compression  $v/v_0$  (figure 2.1). Les propriétés d'une détonation très surcomprimée ( $D \gg D_{\text{CJ}}$ ) et celles d'un choc inerte de même célérité  $D$  sont donc peu différentes.

- Pour  $D = D_{\text{CJ}}$ , il n'y a qu'une possibilité de solution. C'est la situation pour laquelle ( $\mathcal{RM}$ ) et ( $\mathcal{H}$ ) sont tangentes, elle correspond à la situation limite pour laquelle le degré de force tend vers 1 ( $\Delta \rightarrow 0$ ) et les solutions S et W sont confondues. La détonation associée est sonique ( $u_{\text{CJ}} + c_{\text{CJ}} = D_{\text{CJ}}$ ). C'est la détonation Chapman-Jouguet, discontinuité plane totalement réactive la plus lente, discutée ci-après section 2.2.

## 2.2 La détonation comme une discontinuité totalement réactive

### 2.2.1 Autonomie d'une discontinuité

La méthode des caractéristiques est l'outil mathématique privilégié pour analyser les écoulements adiabatiques unidimensionnels plans instationnaires du fluide parfait lorsque son équation d'état est suffisamment simple comme par exemple celle du gaz idéal inerte ou totalement brûlé, *i.e.* non-réactif (section 2.1.2). Tout écoulement adiabatique de fluide parfait ( $de/dt = -pdv/dt$ , (2.3)) et non-réactif ( $de(s,v) = Tds - pdv$ ) est nécessairement isentropique ( $ds/dt = 0$ ), c'est à dire que chaque élément fluide transporte une valeur constante d'entropie massique. Cette valeur est donc une constante d'intégration, et elle peut différer d'un élément fluide à un autre si la distribution d'entropie dans l'ensemble des conditions initiales n'est pas uniforme ( $ds/dt = 0$ ,  $\mathbf{grad}(s) \neq 0$ ).

Par ailleurs, les relations de Rankine-Hugoniot, combinées à l'équation d'état, définissent l'état derrière une discontinuité par une solution à un paramètre, par exemple sa célérité  $D$  (section 2.1). Ainsi, l'entropie massique  $s$  générée au cours du temps par le passage de la discontinuité sera constante si la célérité  $D$  l'est aussi. En d'autres termes, si, dans le plan des variables indépendantes (position  $x$ , temps  $t$ ), l'état derrière la discontinuité est l'ensemble des conditions initiales pour l'écoulement, chaque élément fluide transportera la même valeur d'entropie massique et sa distribution sera uniforme, c'est à dire homentropique ( $ds/dt = 0$ ,  $\mathbf{grad}(s) = 0$ ). Dans ce cas, l'intégration des lois de bilan écrites sous forme caractéristique garantit l'existence d'invariants de Riemann. Ces invariants sont des constantes d'intégration transportées par les fronts avants et arrières des perturbations acoustiques, représentés, dans le plan  $(x,t)$ , par les lignes caractéristiques  $C^+$  ( $dx^+/dt = u + c$ ) et  $C^-$  ( $dx^-/dt = u - c$ ), respectivement. Ainsi, chaque ligne caractéristique transporte une valeur constante d'invariant de Riemann, soit, pour le gaz idéal,  $I^+ = u + 2c/(\gamma - 1)$  sur une trajectoire  $C^+$  et  $I^- = u - 2c/(\gamma - 1)$  pour une trajectoire  $C^-$ . Toutefois, les invariants sont *a priori* différents d'une trajectoire acoustique à une autre d'une même famille, comme l'entropie peut différer d'une trajectoire matérielle à une autre. Si les conditions limites qui garantissent l'homentropie garantissent aussi que les lignes caractéristiques d'une même famille de caractéristiques transportent la même valeur d'invariant de Riemann, l'écoulement associé sera du type "onde simple" et les lignes caractéristiques de l'autre famille seront des lignes droites. C'est le cas si la ligne de données de laquelle est issue une même famille de lignes caractéristiques est une discontinuité de célérité constante  $D$ .

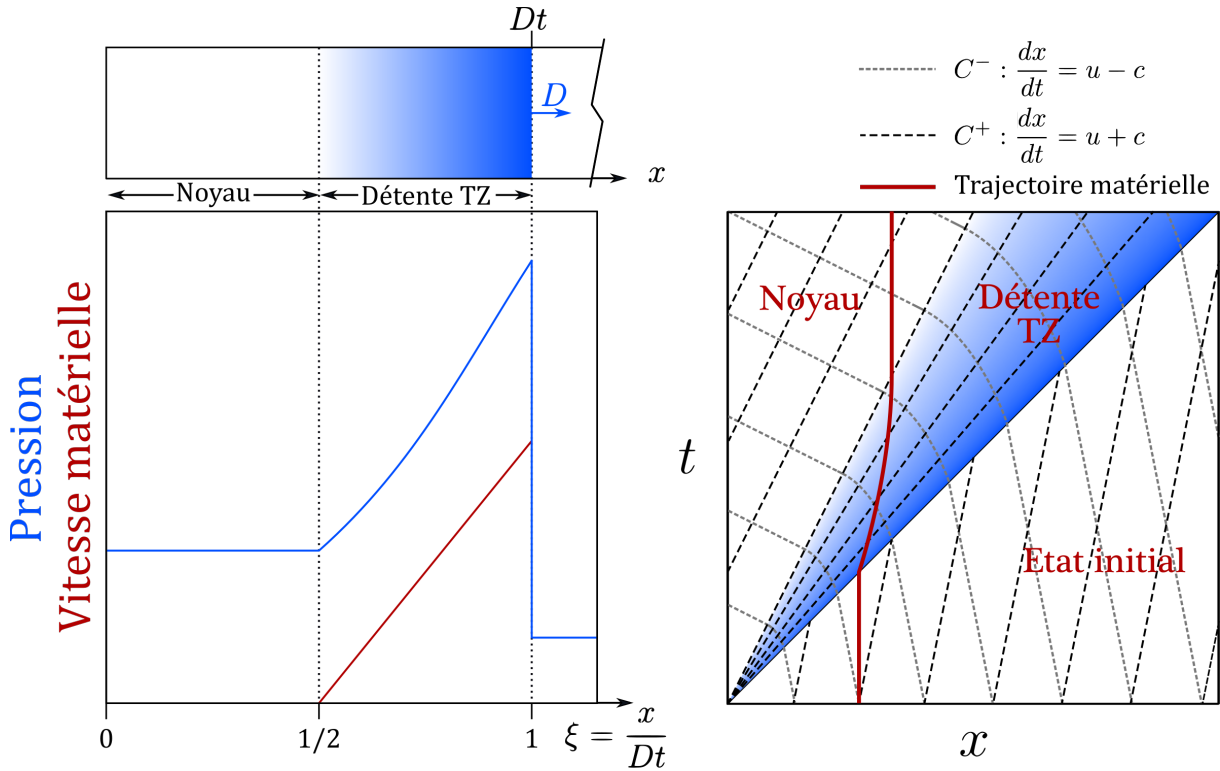


FIGURE 2.2 – Solution de Taylor-Zel'dovich de l'écoulement des gaz brûlés dans un tube à fond fermé et immobile en  $x = 0$ .

Par exemple, pour une discontinuité se déplaçant vers la droite (figure 2.2), se sont les  $C^-$  qui quittent la discontinuité en transportant toutes la même valeur de l'invariant  $I^- = u - 2c/(\gamma - 1)$ . L'écoulement instationnaire derrière cette discontinuité sera donc de type auto-semblable avec pour variable de similitude :

$$\xi = \frac{x}{Dt} = \frac{u + c}{D}. \quad (2.37)$$

En effet,  $u$  et  $c$  étant constants sur chaque  $C^+$ , les pentes de ces dernières le sont également. Cela implique que, puisque la discontinuité pour un tel écoulement instationnaire est de célérité constante, elle est représentée par une droite constituant la ligne caractéristique limite  $C^+$  la plus à droite, et cette discontinuité est sonique, soit  $u + c = D$  à la position de la discontinuité  $\xi = 1$ . On comprend ainsi qu'aucune perturbation acoustique ne puisse rattraper la discontinuité puisque les pentes  $u + c$  des  $C^+$  dans  $(x, t)$  croissent en s'en éloignant. C'est la physique sous-jacente de la condition Chapman-Jouguet.

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

$$\frac{u(\xi)}{D_{\text{CJ}}} = \frac{1}{\gamma_1 + 1} (2\xi - (\gamma_1 - 1) I^-), \quad \frac{c(\xi)}{D_{\text{CJ}}} = \frac{\gamma_1 - 1}{\gamma_1 + 1} (\xi + I^-) \quad (2.38)$$

$$\frac{P(\xi)}{P_{\text{CJ}}} = \left( \frac{c(\xi)}{c_{\text{CJ}}} \right)^{\frac{2}{\gamma_1 - 1}}, \quad \frac{v(\xi)}{v_{\text{CJ}}} = \left( \frac{c(\xi)}{c_{\text{CJ}}} \right)^{\frac{2}{1 - \gamma_1}} \quad (2.39)$$

$$I^- = \frac{1 + \left( \frac{c_0}{D_{\text{CJ}}} \right)^2}{\gamma_1 - 1} \quad I^+(\xi) = \frac{4\xi + (3 - \gamma_1) I^-}{\gamma_1 - 1} \quad (2.40)$$

Elle montre en particulier que, dans le cas d'une propagation dans un tube à partir d'un fond fermé, et dans l'approximation de la discontinuité forte  $(c_0/D_{\text{CJ}})^2 \ll 1$ , c'est à peu près à la moitié de la distance parcourue par le front ( $\xi = 1/2$ ) que la solution auto-semblable se raccorde à la solution imposée par ce fond fermé, soit, un état constant, soit  $p/p_{\text{CJ}} \approx 1/3$  avec  $u = 0$  et pour la plupart des valeurs de  $\gamma$  dans les gaz ( $\gamma \gtrsim 1$ ).

### 2.2.2 Détonation Chapman-Jouguet

La détonation Chapman-Jouguet (CJ) est donc définie comme une discontinuité plane, sonique et totalement réactive derrière laquelle les produits sont à l'équilibre chimique. La condition de sonicité s'exprime par :

$$u_{\text{CJ}} + c_{\text{CJ}} = D_{\text{CJ}} \quad (2.41)$$

avec  $u_{\text{CJ}}$  et  $c_{\text{CJ}}$  les vitesses matérielle et du son des gaz brûlés au front dans le repère du laboratoire. Cette condition ferme le sous-système d'équations constitué des bilans de masse, de quantité de mouvement associés aux relations de Rankine-Hugoniot (2.23-2.25) et de la définition de la célérité du son  $c^2 = \gamma p v$  dans les gaz brûlés. La solution de ce sous-système est donc indépendante de la forme fonctionnelle de l'équation d'état. Elle est valide pour tout les gaz pour lesquels l'expression précédente de la célérité du son l'est. Elle s'écrit :

$$\frac{v_0 p_{\text{CJ}}}{D_{\text{CJ}}^2} = \frac{1 + \frac{p_0 v_0}{D_{\text{CJ}}^2}}{\gamma_{\text{CJ}} + 1}, \quad (2.42)$$

$$\frac{u_{\text{CJ}}}{D_{\text{CJ}}} = \frac{1}{\gamma_{\text{CJ}} + 1} \left( 1 - \gamma_{\text{CJ}} \frac{p_0 v_0}{D_{\text{CJ}}^2} \right), \quad (2.43)$$

$$\frac{v_{\text{CJ}}}{v_0} = \frac{c_{\text{CJ}}}{D_{\text{CJ}}} = \frac{\gamma_{\text{CJ}}}{\gamma_{\text{CJ}} + 1} \left( 1 + \frac{p_0 v_0}{D_{\text{CJ}}^2} \right), \quad (2.44)$$



soit, dans l'approximation de la discontinuité "forte" ( $p_0 v_0 / D_{\text{CJ}}^2 \ll 1$ ) :

$$\frac{v_0 p_{\text{CJ}}}{D_{\text{CJ}}^2} \simeq \frac{u_{\text{CJ}}}{D_{\text{CJ}}} \simeq \frac{1}{\gamma_{\text{CJ}} + 1}, \quad \frac{v_{\text{CJ}}}{v_0} \simeq \frac{c_{\text{CJ}}}{D_{\text{CJ}}} \simeq \frac{\gamma_{\text{CJ}}}{\gamma_{\text{CJ}} + 1}. \quad (2.45)$$

Cependant, les valeurs de  $\gamma_{\text{CJ}}$  et de  $D_{\text{CJ}}$  ne peuvent être obtenues sans le bilan d'énergie, l'équation d'état des produits à l'équilibre et de leur composition. Le système complet permettant de calculer l'ensemble des variables dans l'état CJ, à savoir  $p_{\text{CJ}}$ ,  $v_{\text{CJ}}$ ,  $u_{\text{CJ}}$ ,  $D_{\text{CJ}}$ ,  $c_{\text{CJ}}$ , et  $\mathbf{y}_{\text{CJ}}$ , est ainsi constitué des trois relations de Rankine-Hugoniot (2.23-2.25), de la condition de sonicité (2.41), de l'équation d'état des produits de détonation et des relations d'équilibre chimique pour les espèces chimiques indépendantes (annulation des affinités chimiques ou minimisation de l'énergie de Gibbs). L'obtention de valeurs précises des variables à l'état CJ et de la célérité  $D_{\text{CJ}}$  requiert l'utilisation de codes thermochimiques capables de prendre en compte la dépendance des coefficients thermodynamiques de chaque espèce à la pression et la température. Ces dépendances sont compilées sous formes de tables, par exemple, pour les gaz parfaits, celles de la JANAF [56] utilisées dans beaucoup de codes thermochimiques, *e.g.*, CEA NASA, celui de la suite CANTERA, et STANJAN. C'est ce dernier que nous avons utilisé dans notre étude.

On peut obtenir, à partir des relations (2.42) et (2.43) une expression analytique de la célérité CJ en se donnant une équation d'état simple des produits de détonation, par exemple celle du gaz idéal (2.19), qui supposera donc  $\gamma_{\text{B}} = \gamma_{\text{CJ}}$  et  $y = 1$  comme composition à l'équilibre chimique. Ainsi, en négligeant  $\mu$  :

$$D_{\text{CJ}} = D_* \left( \frac{1}{2} + \frac{\gamma_{\text{B}}}{\gamma_{\text{F}}} \left( \frac{c_0}{D_*} \right)^2 + \frac{1}{2} \sqrt{1 + 4 \frac{\gamma_{\text{B}}}{\gamma_{\text{F}}} \left( \frac{c_0}{D_*} \right)^2} \right) \quad (2.46)$$

$$D_*^2 = 2(\gamma_{\text{B}}^2 - 1)Q_{p0}, \quad c_0^2 = \gamma_{\text{F}} p_0 v_0 \quad (2.47)$$

Nous soulignons que cette solution CJ est indépendante de  $\gamma_{\text{F}}$ . En effet, la présence de  $\gamma_{\text{F}}$  (2.46) pour ce modèle d'équations d'état  $y$  est artificielle car liée à l'introduction de la célérité du son  $c_0 = \sqrt{\gamma_{\text{F}} p_0 v_0}$  (section 2.2.1) par commodité dimensionnelle. En revanche, on peut exprimer  $\gamma_{\text{CJ}}$  en fonction de  $D_{\text{CJ}}$  et de l'état initial ( $c_0$ ,  $\gamma_{\text{F}}$ ) [57].

## 2.3 Modèle ZND

VIEILLE [36] a qualitativement décrit la détonation comme une zone de réaction amorcée par un choc. Entre 1938 et 1945, ZEL'DOVICH, VON NEUMAN et DÖRING ont développé indépendamment un modèle quantifiant cette description. La zone de réaction de la détonation est plane, stationnaire et unidimensionnelle. Nous la détaillons ici pour les besoins de la section 5.3.

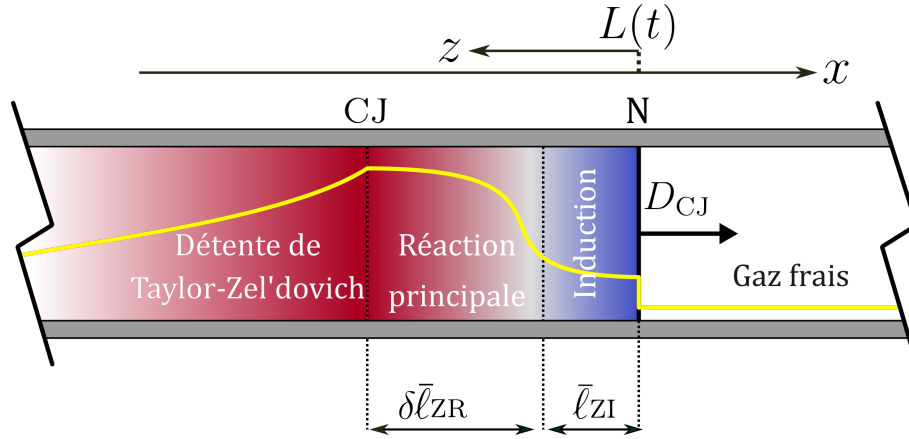


FIGURE 2.3 – Schéma de la détonation ZND et notations. Profil jaune : profil qualitatif de température  $T$ .

La figure 2.3 illustre le modèle ZND et donne les notations. L'origine des distances  $x$  dans le référentiel du laboratoire est une position arbitraire  $L_0 = 0$  du choc, et l'origine des temps  $t$  est l'instant  $t_0 = 0$  quand une particule de fluide entre dans la zone de réaction ZND. Ainsi, pour tout instant  $t > t_0$ , la position du choc est  $L(t) = Dt$  et la distance relative de cette position est  $z(x,t) = Dt - x$ . Le régime stationnaire désigne l'invariance de toute variable  $f$  par rapport à  $L(t)$  à une distance donnée  $z$  dans la zone de réaction. Avec  $f(t,x)$  et  $f(t,z)$  les représentations correspondantes, il vient :

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_x + D \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_t = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_z = 0. \quad (2.48)$$

Les équations d'Euler pour les écoulements 1D plans s'écrivent :

$$\left(\frac{\partial \rho}{\partial t}\right)_x + \left(\frac{\partial \rho u}{\partial x}\right)_t = 0, \quad (2.49)$$

$$\left(\frac{\partial \rho u}{\partial t}\right)_x + \left(\frac{\partial p + \rho u^2}{\partial x}\right)_t = 0, \quad (2.50)$$

$$\left(\frac{\partial \rho E}{\partial t}\right)_x + \left(\frac{\partial (p + \rho E) u}{\partial x}\right)_t = 0, \quad (2.51)$$

avec  $E = e + u^2/2$ ,  $e$  l'énergie interne spécifique,  $u$  la vitesse matérielle dans le référentiel du laboratoire,  $p$  la pression, et  $\rho$  la masse volumique. Soit  $\mathbf{f}$  le vecteur des variables indépendantes  $U = D - u$  la vitesse matérielle dans le référentiel du choc,  $\mathbf{y}$  le vecteur des fractions massiques  $y_k$  des  $K$  espèces chimiques et  $t_m(z)$  le temps relatif à une particule fluide pour atteindre la position  $z$ . En indiquant par  $\mathbf{N}$  les variables sur le plan ( $z = 0$ ,  $t = 0$ ) du choc se propageant à une vitesse  $D$  dans un milieu de composition, pression et température initiales  $\mathbf{y}_0$ ,  $p_0$  et  $T_0$ , les équations d'Euler pour ce régime stationnaire se réduisent en un système d'équations différentielles :

$$\frac{d\mathbf{f}}{dz} = \mathbf{F}(\mathbf{f}, D), \quad \mathbf{f}(z=0) = \mathbf{f}_N(D, p_0, T_0, \mathbf{y}_0), \quad (2.52)$$

avec les dérivées matérielles  $d./dz \equiv \partial./\partial z)_t$  (puisque ici  $\partial./\partial t)_z = 0$ , cf. (2.48). En notant  $v = 1/\rho$  la masse volumique,  $M_a = U/c$  le nombre de Mach, le système (2.52) se développe :

$$\frac{dU}{dz} = \frac{\dot{\sigma}}{1 - M_a^2}, \quad (2.53)$$

$$\frac{dp}{dz} = -\rho U \frac{\dot{\sigma}}{1 - M_a^2}, \quad (2.54)$$

$$\frac{dv}{dz} = \frac{1}{\rho U} \frac{\dot{\sigma}}{1 - M_a^2}, \quad (2.55)$$

$$\frac{d\mathbf{y}}{dz} = \frac{\mathbf{w}}{U}, \quad (2.56)$$

$$\frac{dt_m}{dz} = \frac{1}{U}, \quad (2.57)$$

Avec les relations thermo-hydrodynamiques :

$$c^2 = v^2 \frac{p + \frac{\partial e}{\partial v})_{p, \mathbf{y}}}{\frac{\partial e}{\partial p})_{v, \mathbf{y}}}, \quad \sigma_k = \frac{-v}{c^2} \frac{\partial e}{\partial y_k})_{p, v, y_j \neq k}. \quad (2.58)$$

Les codes de calcul implémentent en général les équations d'état sous la forme  $h(T, p, \mathbf{n})$  et  $v(T, p, \mathbf{n})$  avec  $h = e + pv$  l'enthalpie massique et  $\mathbf{n}$  le vecteur des titres en mole. Les règles de dérivation des fonctions composées permettent de transformer leurs dérivées en dérivées hydrodynamiques (2.58). L'intégration conjointe de l'identité (2.57) et des équations (2.53) à (2.55) permet d'obtenir les relations spatio-temporelles matérielles  $t_m(z)$  et  $z_m(t)$ .

La combinaison des équations bilans de masse, d'énergie et de quantité de mouvement (relations d'Euler) en régime stationnaire permette de les réécrire sous la forme des relations de Rankine-Hugoniot ( $\mathcal{RH}$ ) liant les variables initiales à celles à toute distance  $z$  parcourue

et temps  $t$  écoulé depuis le choc, *i.e.* depuis l'état initial immédiatement devant celui-ci :

$$\rho_0 D = \rho U, \quad (2.59)$$

$$p_0 + \rho_0 D^2 = p + \rho U^2, \quad (2.60)$$

$$h_0 + \frac{1}{2} D^2 = h + \frac{1}{2} U^2. \quad (2.61)$$

Dans le cas d'un choc inerte, il n'y a pas de variation de composition chimique donc  $\mathbf{y}_H = \mathbf{y}_0$ . Ces relations  $\mathcal{RH}$  et les équations d'état des enthalpies initiale  $h_0$  et au choc  $h_N$  donnent les conditions initiales  $\mathbf{f}_N(D, p_0, T_0, y_0)$  pour les profils de variables données par l'intégration du système (2.52). La valeur de la vitesse de choc  $D$  est estimée dans un premier temps par la valeur  $D_{CJ}$ , obtenue par résolution des relations  $\mathcal{RH}$  pour une réaction chimique à l'équilibre à composition finale  $\mathbf{y}_{eq}(T, p)$ , enthalpie  $h_{eq}(T, p, \mathbf{y}_{eq})$ , volume massique  $v_{eq}(T, p, \mathbf{y}_{eq})$  et la vitesse matérielle  $U = c_{eq}(T, p)$ , où  $c_{eq}$  est la vitesse du son à l'équilibre exprimée par

$$c_{eq}^2 = v^2 \frac{\left( p + \frac{\partial e_{eq}}{\partial v} \right)_p}{\left( \frac{\partial e_{eq}}{\partial p} \right)_v} \neq (c^2)_{eq} = c^2(T, p, \mathbf{y}_{eq}(T, p)). \quad (2.62)$$

Une résolution par itérations successives sur (2.52) initiée par  $D_{CJ}$  vise à encadrer la valeur de  $D$  garantissant sur des valeurs physiquement cohérentes, c'est-à-dire bornées, au point sonique ( $M_a = 1, \mathbf{w} = 0_{K,1}$ ). On obtient alors les profils, les évolutions de variables et la vitesse dite "figée"  $D_{CJ-f}$ , puisque fondée sur la valeur à l'équilibre de la célérité du son figée (2.62). Elle diffère en général de manière négligeable de  $D_{CJ}$ . Nous avons utilisé le code Caltech ZND avec les schémas cinétiques détaillés précisés section 5.4.

## 2.4 Détonations cellulaires

Il faut attendre 1959 pour que la structure multicellulaire de la zone de réaction des détonations soit expérimentalement mise en évidence par DENISOV et TROSHIN [43, 58, 59]. On peut la détecter simplement par les traces d'érosion que laissent les cellules sur un dépôt de carbone sur une plaque métallique apposée à la paroi du tube dans lequel la détonation se propage. Le balayage du carbone par les bords des cellules dessine des losanges plus ou moins réguliers, un impact frontal de la détonation donne un instantané des motifs cellulaires. La Figure 2.4 montre des exemples de nos enregistrements.

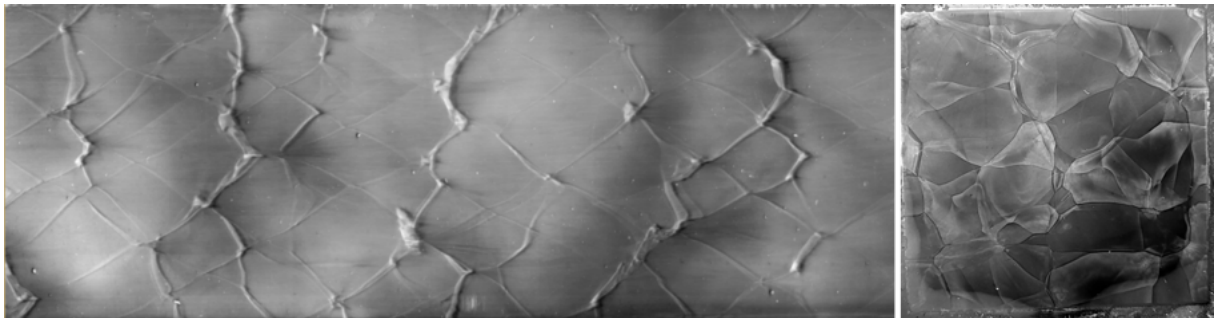


FIGURE 2.4 – Cellules de détonation par traces sur dépôts de carbone. Gauche : chemins suivis longitudinalement par les bords des cellules. Droite : instantané de face des cellules. Mélange :  $2\text{H}_2 + \text{O}_2$  à  $p_0 = 15\text{ kPa}$ . Tube à section carrée  $40 \times 40\text{ mm}^2$ .

CAMPBELL et WOODHEAD en 1926 [60] puis BONE et FRASER [61] en 1929 avaient déjà questionné le caractère monodimensionnel de l'écoulement des produits de détonation à l'aide d'enregistrements par caméra à miroir tournant. SHCHELKIN [62], ZEL'DOVICH [63], MANSON [64], TAYLOR [65] et FAY [66] avaient indépendamment interprété leurs observations par la présence d'une onde transverse à la direction de propagation. On sait aujourd'hui qu'elles correspondent à des conditions particulières, limites, de propagation qui conduisent à des régimes qualifiés de marginaux, c'est-à-dire avec un nombre restreint d'ondes transverses, voire une seule (fig. 2.5). Le régime habituel de détonation est, lui, qualifié de multicellulaire, les modèles CJ et ZND en constituent des moyennes.

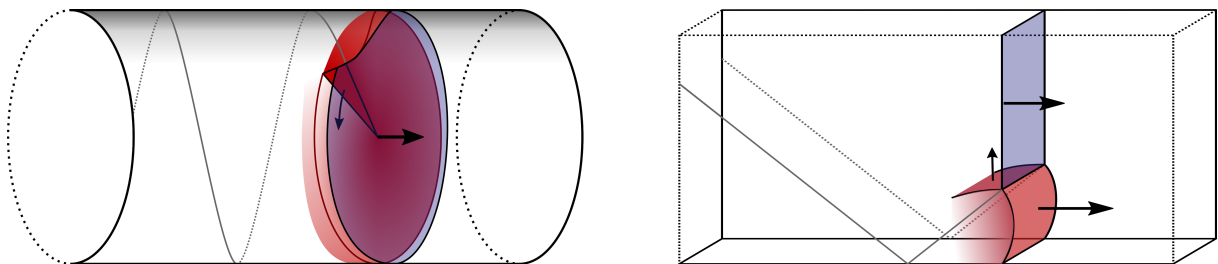


FIGURE 2.5 – Schémas de modes marginaux de détonation à une onde transverse en tube rond (gauche) et rectangulaire (droite)

## 2.4.1 Cellule de détonation

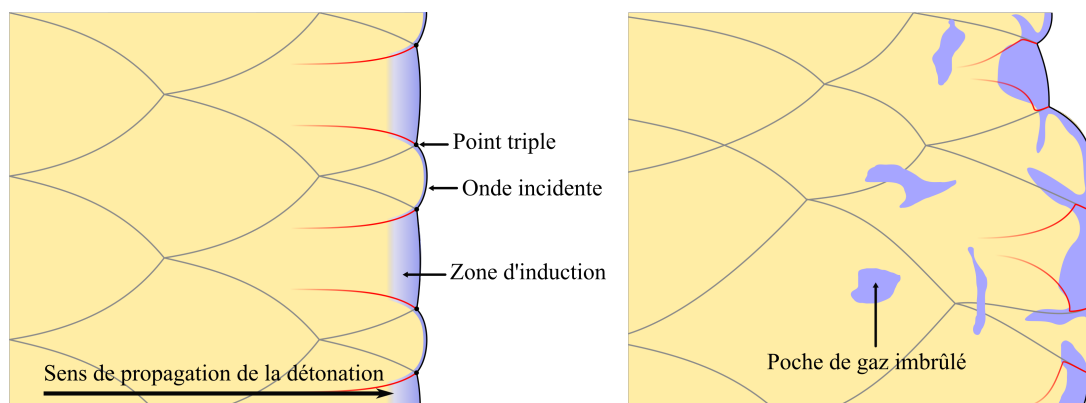


FIGURE 2.6 – Schéma d’une coupe longitudinale de la structure cellulaire de la détonation. Gauche : structure régulière, droite : structure très irrégulière.

La structure multicellulaire de détonation est la signature expérimentale, intrinsèque, du régime habituel de détonation, *e.g.* [25]. C’est un ensemble de structures de Mach composées d’ondes de choc incidentes se propageant dans la direction de propagation globale de la détonation et d’ondes transverses qui se propagent perpendiculairement à cette direction (figure 2.6). L’intersection de deux ondes incidentes et d’une onde transverse constitue une ligne triple. Un point triple désigne communément l’intersection d’une ligne triple avec la paroi du confinement [67].

La collision de deux ondes transverses produit localement une détonation initialement surcomprimée [25] constituée d’un choc courbé de célérité  $D \approx 1,6 \sim 1,8D_{CJ}$ , *e.g.* [68] suivie d’une zone de réaction [69]. Les observations par imagerie PLIF d’AUSTIN, PINTGEN et SHEPHERD [70-73] montrent que le temps d’induction y est très court comparé à celui derrière les ondes incidentes plus faibles (*i.e.* plus lentes) formées antérieurement aux collisions les plus récentes. Cependant, ce choc décélère continûment sous l’effet des expansions latérale et longitudinale de l’écoulement, jusqu’à  $D \approx 0,8D_{CJ}$  [68, 74]. Le temps d’induction ne cesse donc de croître [75] derrière ce choc et finit par devenir trop long, et les fronts de choc et de combustion finissent par se découpler [69].

Pour les cellules raisonnablement irrégulières, le découplage survient, par symétrie, approximativement à la moitié de la longueur d’une cellule. Pour les cellules les plus irrégulières, les visualisations ont permis d’observer l’advection de poches de gaz imbrûlés [70, 72, 76].

Ces observations sont souvent faites dans des configurations fortement bidimensionnelles, *i.e.* en tubes de sections rectangulaires dont la dimension transverse dans la direction de visualisation est plus petite que l’autre.

### 2.4.2 Largeur de cellule

Les comportements dynamiques des détonations sont approximativement auto-semblables par rapport à la largeur moyenne, désignée  $\bar{\lambda}_C$ , des losanges dessinés longitudinalement sur les dépôts de carbone. Elle constitue une longueur fondamentale de la dynamique des détonations et a fait l'objet de nombreuses analyses. VASIL'EV en a proposé une revue [77]. Elle donne une mesure de la détonabilité d'un pré-mélange : plus  $\bar{\lambda}_C$  est petit devant la dimension transverse du confinement, plus la détonation se propagera facilement dans celui-ci. La base de données de Caltech [78] recense un grand nombre de largeurs de cellules. La largeur dépend du pré-mélange réactif, à savoir ses combustibles, comburant, richesse  $\phi$ , et température  $T_0$  et pression initiales  $p_0$ , *e.g.*, [79-81]. Elle dépend également du confinement (*e.g.* section 4, *cf.* 4.1.1), et de la dynamique du front d'ondes (*e.g.* propagation en tube droit, transmission dans un grand volume). La largeur de cellule de référence pour des conditions données  $p_0$ ,  $T_0$ ,  $\phi$  d'un pré-mélange est celle d'une détonation de vitesse moyenne CJ, c'est-à-dire mesurée dans un tube droit, lisse et suffisamment large. Elle est obtenue à partir de la moyenne des plus grandes distances entre les trajectoires de points triples tracées par des ondes transverses se propageant dans des directions opposées [82]. Des sous-structures sont observées dans certains mélanges instables [25, 83] dont le processus de libération d'énergie est réalisé sous la forme d'une succession d'induction et de réaction [84, 85]. Il y a alors deux largeurs moyennes de cellules. Les mécanismes responsables des irrégularités des structures cellulaires ont des conséquences à l'échelle macroscopique, c'est-à-dire sur les comportements dynamiques, *e.g.*, transmission dans un grand volume [29].

### 2.4.3 Régularité de la structure et stabilité du mélange

Les structures cellulaires ont été catégorisées en quatre ensembles selon la régularité des losanges dessinés sur les dépôts de carbone, soit, très régulières, régulières, irrégulières et très irrégulières [86, 87]. La figure 2.7 montre le schéma de cette classification par LIBOUTON et VAN TIGGELEN. Cette classification a été établie à partir d'enregistrements dans des tubes de section carrée ou rectangulaire. Elle est essentiellement qualitative et subjective [88, 89]. Par exemple, les cellules pour le mélange  $2\text{H}_2 + \text{O}_2$  peuvent être qualifiées d'irrégulières, tel que le montre l'enregistrement en figure 2.4, mais sont quelquefois classées comme régulières.

De nombreux travaux ont porté sur la recherche de critères quantitatifs d'irrégularité. STREHLOW attribue la régularité à la force des ondes transverses [76]. MANZHALEI [90]

associe l'irrégularité aux grandes valeurs d'énergie d'activation réduite  $E_a/RT_N$  (2.11). AUSTIN et al. [72] la lie à la valeur du nombre de Mach de l'onde CJ ( $D_{CJ}/c_0$ ).

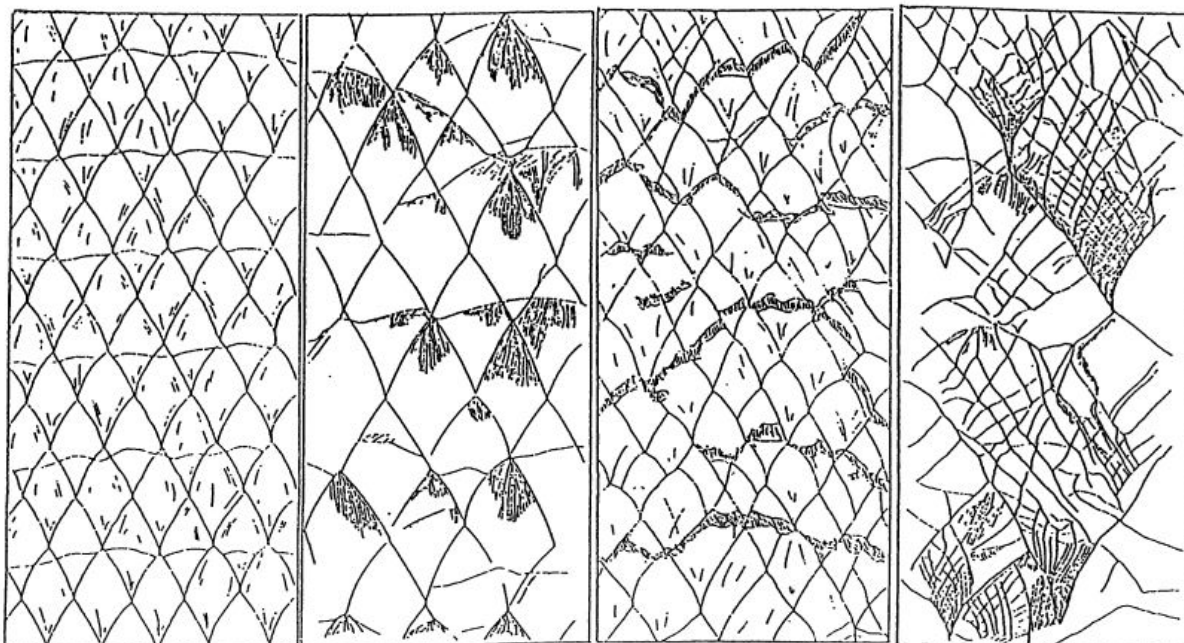


FIGURE 2.7 – Schémas de classification des structures cellulaires par LIBOUTON et VAN TIGGELEN [87]. De gauche à droite : structure très régulière, régulière, irrégulière, très irrégulière.

Les mélanges sont qualifiés de stables s'ils produisent des losanges réguliers et d'instables sinon. Ainsi, les mélanges  $H_2 : O_2$  dilués dans un gaz mono-atomique comme l'argon [29] sont qualifiés de stables, *i.e.* les ondes transverses dessinent des losanges quasi-identiques, superposables. Les mélanges hydrocarburés dilués dans un gaz diatomique, *e.g.*  $CH_4 + O_2 + N_2$ , sont au contraire instables et produisent des losanges irréguliers ou très irréguliers [72, 89, 91]. La notion de régularité reste difficile à quantifier car elle résulte du couplage entre la cinétique chimique du mélange [29, 90, 92-96] et la dynamique de l'écoulement selon les conditions aux limites et initiales [25]. Par exemple, la surcompression de la détonation augmente la régularité [90]) pour un même tube, et des tubes pas assez larges influent sur la dynamique des ondes transverses.

SHORT et SHARPE [97] sont les premiers à avoir lié l'irrégularité au rapport des longueurs d'induction et de réaction ZND combiné à l'énergie d'activation réduite (section 2.3), pour une réaction chimique modèle à deux étapes, distinguant bien les épaisseurs d'induction et de réaction principale. Ils ont observé que les grandes valeurs d'un nombre sans dimension, aujourd'hui désigné par  $\chi$  [23, 98], étaient associées à de plus grandes instabilités de la zone de réaction ZND et, donc, à des cellules plus irrégulières. Ce nombre



est défini par

$$\chi = \frac{E_a}{RT_N} \cdot \frac{\bar{\ell}_{ZI}}{\delta \bar{\ell}_{ZR}}, \quad (2.63)$$

avec  $\bar{t}_{ZI}$ ,  $\delta \bar{t}_{ZR}$ ,  $\bar{\ell}_{ZI}$  et  $\delta \bar{\ell}_{ZR}$  les temps et longueurs d'induction et de réaction et  $E_a/RT_N$  l'énergie d'activation réduite.

SOLHOUKIN [30] et SUBBOTIN [99] avaient déjà souligné, en substance, l'existence de deux catégories de cellules de détonation distinguées par leur régularité, c'est-à-dire, leur mécanismes de combustion cellulaire [97, 98, 100]. Les moins irrégulières sont de type essentiellement adiabatique. Le mécanisme de combustion dominant est l'amorçage par choc suivi d'une combustion complète dans le très proche voisinage du choc résultant de la collision des ondes transverses. Leurs modélisations et simulations sont compatibles avec les équations d'Euler pour le fluide parfait réactif (2.3). Les plus irrégulières sont de type non-adiabatique. Le mécanisme inclue la participation de combustion par diffusion turbulente des poches advectées de gaz imbrûlé, et leur modélisations et simulations nécessitent les équations de Navier-Stokes.

Nous soulignons qu'une trop grande irrégularité remet en question la pertinence d'une valeur moyenne de largeur de structure cellulaire, puisqu'alors l'écart-type des largeurs en est du même ordre de grandeur [88]. Nous observons enfin que le nombre  $\chi$  qui détecte les cellules non-adiabatiques repose sur des grandeurs déterminées à partir du modèle ZND adiabatique.

#### 2.4.4 Structure cellulaire et confinement

Les premières observations relatives à l'instabilité de la zone de réaction des détonations sont en fait relatives à des régimes marginaux de propagation, très liés à la géométrie du confinement. Dans ces situations, le nombre de cellules sur le front est très limité, il peut même n'y avoir qu'une seule onde transverse. Ainsi, le régime marginal à une seule onde transverse est celui de la détonation "hélicoïdale" en tube de section ronde [101-104] et en "zig-zag" en tube de section rectangulaire.

Si le nombre d'ondes transverses n'augmente que peu, la détonation reste qualifiable de marginale dans la mesure où le confinement garde une influence, certes décroissante, sur sa structure cellulaire [105]. Ainsi, les régimes à 2, 3 ou 4 ondes en tube rond décrits par DENISOV et TROSHIN [58] et VOITSEKHOVSKII [106] comme une combinaison de détonations hélicoïdales peuvent être considérés comme marginaux.

Dans un tube carré ou rectangulaire, les ondes transverses peuvent se répartir en deux

ensembles de fronts perpendiculaires les uns aux autres [101, 107]. Si chacun est également perpendiculaires aux parois de tube, on parle de mode rectangulaire. Les ondes transverses peuvent aussi se propager avec un angle de  $\pi/4$  par rapport aux parois, et on parle alors de mode diagonal. Il a été observé par simulation numérique par WILLIAMS et *al.* [108] puis expérimentalement par HANANA et *al.* [109, 110] après diffraction du front de détonation à travers un diaphragme carré tourné de  $\pi/4$  par rapport à la section du tube. Dans ce cas particulier d'une section carrée, les volumes dessinés par les ondes transverses au cours de l'avancée du front sont des octaèdres et des tétraèdres [74]. Les simulations numériques suggèrent que le mode rectangulaire est équivalent à la superposition de deux détonations bidimensionnelles (planes) perpendiculaires à l'axe de tube et indépendantes l'une de l'autre [107, 108, 111, 112]. Beaucoup de simulations numériques de modes rectangulaires et diagonaux sont fondées sur les équations d'Euler (section 2.1) avec mécanismes détaillés de cinétique chimique ou des lois d'Arrhenius simples combinées à l'équation d'état à  $\gamma$  constant (section 2.1), [113-118].

Les régimes marginaux ne sont observables que si le nombre d'ondes transverses est suffisamment faible [70], *i.e.* soit si la dimension transverse du confinement n'excède pas 5 à 10 fois la largeur de cellule, selon les mélanges [25]. Dans ce cas, les ondes transverses sont considérées être en "résonance acoustique" [73], c'est-à-dire contraintes par les dimensions transverses de tube [88].

Les régimes habituels de détonation sont associés à la situation inverse, pour laquelle les cellules sont de petite taille par rapport à la dimension transverse du tube ou à la taille de la détonation elle-même. Il existe de nombreuses observations et enregistrements de régimes de détonation multicellulaire (*e.g.* [70, 119]), mais l'influence du confinement sur les propriétés géométriques d'un grand ensemble de cellules semble avoir reçu peu d'attention.



# Techniques et méthodologies expérimentales

## Sommaire

<b>3.1 Tubes à détonation</b>	<b>32</b>
3.1.1 Sections constantes	32
3.1.2 Sections croissantes	33
<b>3.2 Obstacle de diffraction</b>	<b>35</b>
<b>3.3 Caractérisation des fronts de détonation</b>	<b>36</b>
3.3.1 Enregistrement de traces sur dépôt de carbone	36
3.3.2 Méthodes optiques	36
<b>3.4 Amorçage de la détonation</b>	<b>38</b>
<b>3.5 Prémélanges réactifs</b>	<b>38</b>

Nos expériences sont réparties en deux ensembles, pour chacun desquels nous avons étudié l'influence de la forme (ronde ou carrée) de la section du tube sur le comportement de la détonation et de sa structure cellulaire. Le premier est relatif à des aspects propagatifs, l'un stationnaire en tube de section droite, l'autre instationnaire en tube de section croissante. Le second est relatif à des comportements transitoires liés à des aspects d'amorçage par transmission d'une détonation à travers une plaque perforée.

Ce chapitre décrit les techniques et méthodes expérimentales mises en œuvre.

## 3.1 Tubes à détonation

Nous avons utilisé deux tubes dont les sections ont la même aire  $16,0 \pm 4\%$  cm<sup>2</sup>, mais des formes différentes, carrée (C) ou ronde (R), tant pour les aspects propagatifs que transitoires. Nous avons admis que tous nos tubes sont lisses. En effet, leur rugosité est issue de leur procédé d'obtention (respectivement usinage/électro-érosion et extrusion), *i.e.* faible, avec une rugosité relative négligeable, de l'ordre de  $\mathcal{O}(10^{-4})$  [120, 121].

### 3.1.1 Sections constantes

Pour les aspects propagatifs en tubes droits, nous avons aussi réalisé quelques expériences dans des tubes de sections à formes carrée (C') ou ronde (R') et d'aires plus grandes que 16 cm<sup>2</sup>, soit 25 cm<sup>2</sup> pour (C') et 70.8 cm<sup>2</sup> pour (R') Nous avons également considéré un tube de section triangulaire 16,1 placé à une extrémité du tube rond (R'). Le tableau 3.1 résume les dimensions des tubes. La figure 3.1 illustre leur instrumentation pour la section 16 cm<sup>2</sup>. Trois capteurs de pression piézoélectriques Kistler 603B (P), le premier à 2 m de l'allumage, puis espacés de 250 mm chacun sont reliés à des amplificateurs de charge Kistler 5018A. Leurs signaux permettent de déterminer la vitesse moyenne de la détonation et les profils de détente.

TABLE 3.1 – Dimensions des tubes de détonation

Notation	Forme	Aire cm <sup>2</sup>	Diamètre/Côté mm	Longueur m
R	Ronde	16,6	46	4.33
C	Carrée	16,0	40	4.33
R'	Ronde	70,8	95	10
C'	Carrée	25,0	50	6
T	Triangulaire	16,1	61	1

La technique d'enregistrement de la structure cellulaire sur dépôt de carbone (section 3.3.1) est utilisée pariétalement sur une longueur de 500 mm à partir de la position 3830 mm de l'allumage (L). Elle est aussi utilisé en impact frontal sur la paroi de fond de tube (F), également recouverte d'un dépôt de carbone. Cette méthode est plus simple que la méthode optique mise en oeuvre par PRESLES et *al.* [119], destinée à l'origine aux explosifs liquides. Celle-ci consistait à photographier la déviation de lumière résultant de la déformation d'une feuille d'aluminium tendue en fin de tube au moment de l'impact du front cellulaire.

Nous n'avons pas placé de capteurs de pression sur les tubes rond (R') et triangulaire.

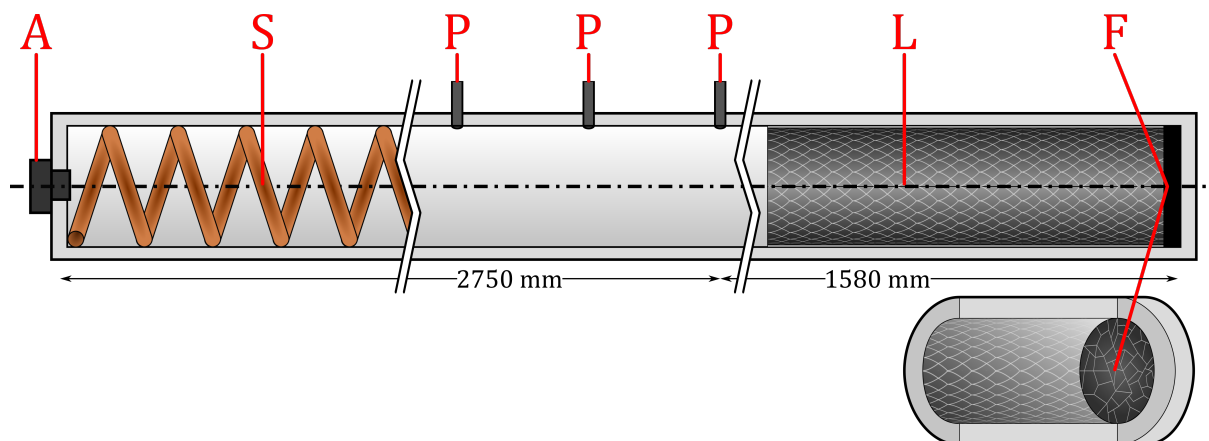


FIGURE 3.1 – Schématisation du tube rond de section  $16 \text{ cm}^2$  en configuration "propagation simple". A : allumage, S : spirale de Shchelkin, P : capteur de pression piézoélectrique, L : plaque à dépôt de carbone longitudinale, F : plaque à dépôt de carbone frontale.

Pour ces cas, nous avons déduit la constance de la vitesse de détonation de celle des formes moyennes des cellules enregistrées sur les parois longitudinales, et de celles de leurs largeurs moyennes, comparativement aux enregistrements dans des sections plus petites ou égales pour les mêmes pressions initiales.

### 3.1.2 Sections croissantes

Des tronçons de 300 mm de long et de section croissante sont placés à l'extrémité opposée de l'allumage des tubes carré (C) et rond (R) de section initiale  $A_0 = 16 \pm 4\% \text{ cm}^2$  (figure 3.2).

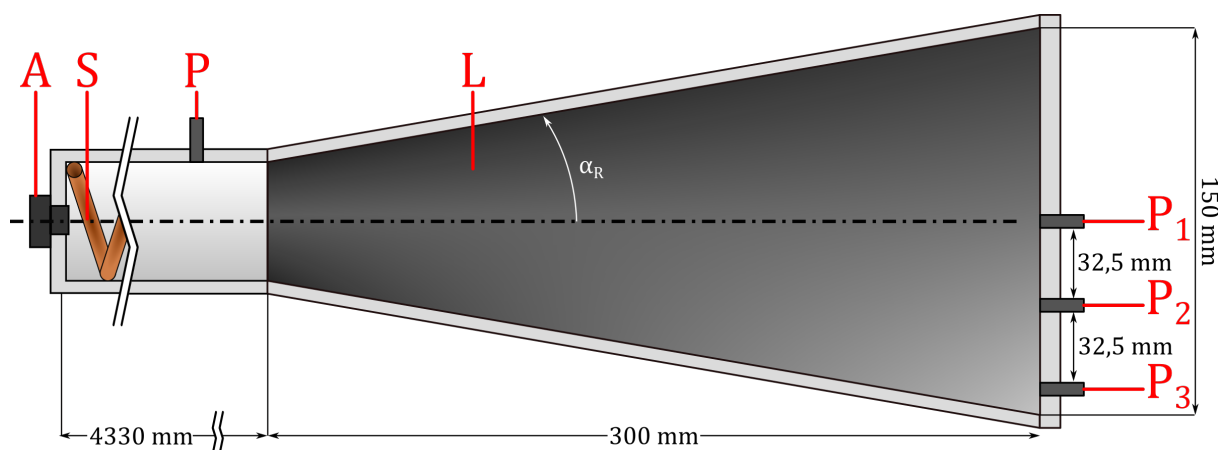


FIGURE 3.2 – Schéma du tronçon divergent en fin de tube de propagation. A : allumage, S : spirale de Shchelkin,  $P_n$  : capteur de pression piézoélectrique, L : plaque à dépôt de carbone

Les demi-angles des tronçons divergents carré  $\alpha_C = 8,6^\circ$  et rond  $\alpha_R = 9,8^\circ$  ont été choisis tels que l'aire  $A$  à une même abscisse  $x$  est la même pour les deux formes de section, *i.e.*  $\forall x \geq 0, A_R(x) = A_C(x)$ . La méthode d'enregistrement sur dépôt de carbone (section 3.3.1) est utilisée sur les parois longitudinales et sur des plaques frontales placées à des abscisses successives. Des capteurs de pression piézoélectriques ( $P_i$ ) sont répartis sur la bride de fond, selon le schéma 3.3, et un autre ( $P$ , figure 3.2) est situé 12,5 mm en amont du tronçon divergent.

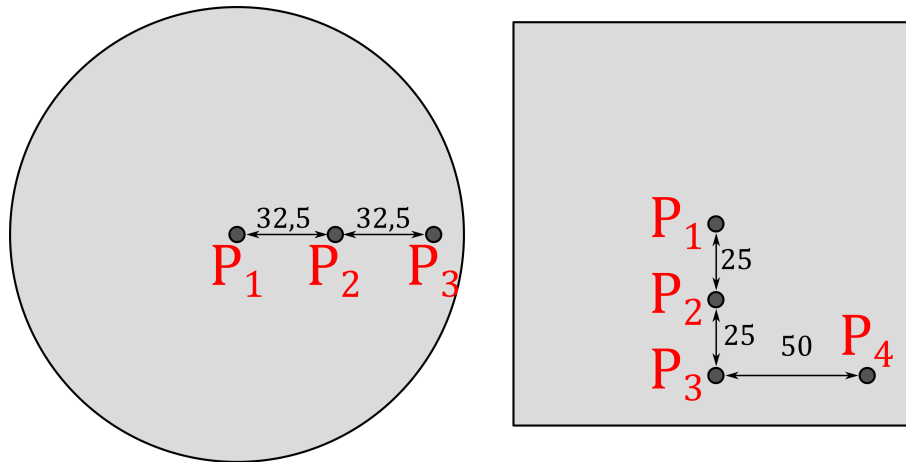


FIGURE 3.3 – Position des capteurs de pression sur les brides de fond des tronçons de sections croissantes

Le mélange retenu pour cette partie est  $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 2\text{Ar}$  à  $p_0 = 20\text{ kPa}$ .

## 3.2 Obstacle de diffraction

Pour la diffraction de la détonation à travers un orifice (section 4.3), le capteur de pression le plus en aval de l'allumage est remplacé par un obstacle, comme illustré sur la figure 3.4 (O). À cette position, la détonation est autonome, comme nous le vérifierons lors d'expériences dans des tubes sans obstacle. Tous les obstacles étudiés sont des plaques percées d'un orifice de même forme que la section de tube, leur épaisseur est de 5 mm. Nous avons considéré plusieurs rapports d'ouverture  $RO = 10, 25, 50, \text{ et } 75\%$ , définis comme le rapport des sections de l'orifice et du tube. En fin de tube, une pelote de paille de fer (R) amortit l'onde de choc avant sa réflexion sur la bride de fond. Les enregistrements sur dépôt de carbone sont réalisés de part et d'autre de l'obstacle dans chacun des tubes.

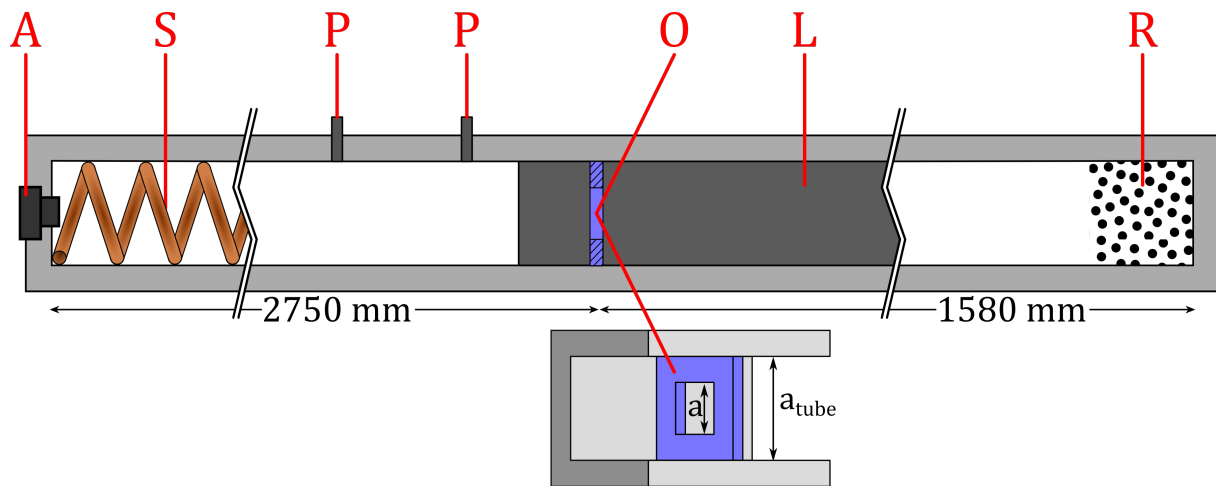


FIGURE 3.4 – Tube carré de section  $16 \text{ cm}^2$  pour l'étude section 4.3. A : allumage, S : spirale de Shchelkin, P : capteur de pression piézoélectrique, O : obstacle, L : plaque à dépôt de carbone ou hublot de quartz, R : paille de fer



## 3.3 Caractérisation des fronts de détonation

### 3.3.1 Enregistrement de traces sur dépôt de carbone

L'enregistrement des traces sur dépôt de carbone est utilisé dans chaque campagne expérimentale (sections 4.1 à 4.3). MACH et SOMMER l'ont mise au point pour étudier les ondes de choc, elle fut ensuite implémentée par DENISOV et TROSHIN pour les détonations [122]. Pour notre part, nous générons le carbone par une flamme de diffusion d'acétone car ce combustible produit des suies très fines. Nous réalisons le dépôt en balayant une surface métallique avec la flamme. La surface métallique est soit une feuille de clinquant métallique apposée ensuite à la paroi du tube, soit la paroi elle-même. Lors du passage de la détonation, l'interaction des ondes transverses avec la plaque érodent localement le carbone. Après le tir, la surface est extraite du banc expérimental, puis scannée avec une résolution de 1200 dpi ou photographiée. Le logiciel GIMP permet de traiter l'image enregistrée pour en augmenter le contraste. Ce traitement est une bijection de la plage de niveaux de gris de l'image vers une plage de niveaux de gris complète. L'image d'origine peut donc être retrouvée à partir de l'image traitée. Un réglet est scanné avec l'enregistrement de traces sur dépôt de carbone, il sert à calibrer le logiciel ImageJ utilisé pour la mesure des distances à une précision de  $\pm 0,05$  mm.

### 3.3.2 Méthodes optiques

Dans les tube carrés, deux parois métalliques en vis-à-vis peuvent être remplacées par des hublots de quartz pour permettre les visualisations.

La première méthode optique est la visualisation directe de la chimiluminescence. La combustion du mélange  $2\text{H}_2 + \text{O}_2$  et la vapeur d'eau à température de fin de réaction émettent une lumière dans le spectre visible capturée par une caméra ultra-rapide Shimadzu HPVX-2 qui enregistre 256 images sur une fréquence d'acquisition entre 1 et 2 MHz pour un temps d'exposition de 200 ns.

La seconde est l'ombroscopie, illustrée figure 3.5. Une lampe à vapeur de mercure d'une puissance de 500W (SL) émet une source ponctuelle de lumière. Le cône de lumière est collimaté par un miroir concave (M) de distance focale 1,5 m et de diamètre 150 mm. Le faisceau de lumière parallèle résultant traverse le tube à détonation par les hublots de quartz. La loi de Gladstone-Dale relie l'indice de réfraction  $n$  d'un gaz à sa masse volumique  $\rho$  par la relation  $n - 1 \propto \rho$  [123]. Ainsi, la lumière est déviée par les gradients

de masse volumique selon la loi de Snell-Descartes  $n_1 \sin(i_1) = n_2 \sin(i_2)$ , avec  $i$  les angles à la normale de l'interface des rayons lumineux. Après passage dans le tube, les rayons lumineux sont focalisés par une lentille convergente (C) de longueur focale 750 mm où le diaphragme (D), d'ouverture 1 mm, bloque les rayons déviés par les gradients de masse volumique. Les rayons passant dans l'ouverture, donc non bloqués, sont collimatés par la lentille de collection (C') de distance focale 65 mm, puis capturés par la caméra. Ainsi, les rayons déviés n'atteignant pas la caméra, les régions présentant des gradients de masse volumique apparaissent assombris à l'image.

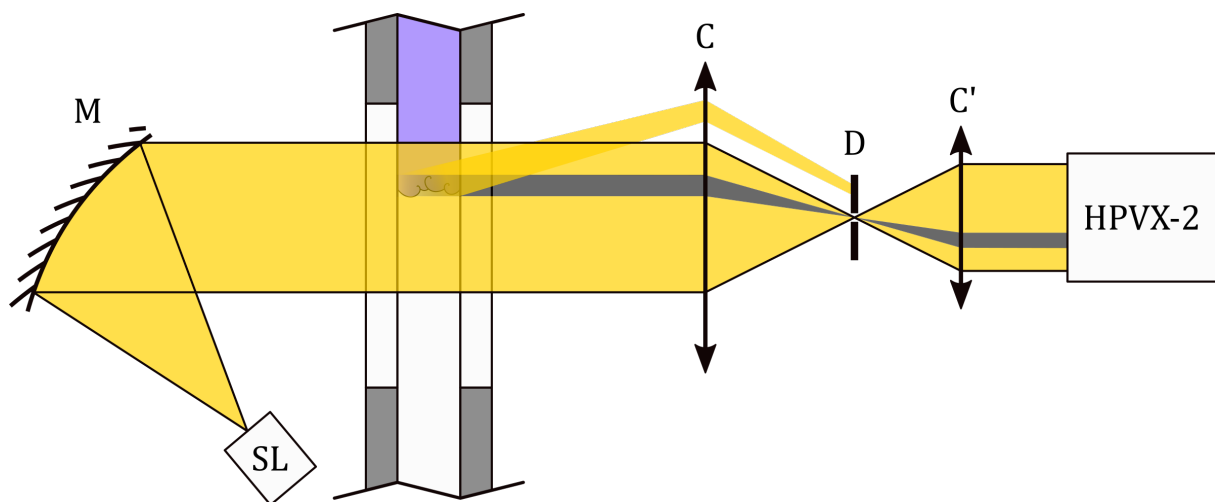


FIGURE 3.5 – Principe de l'ombroscopie. SL : Source ponctuelle de lumière, M : Miroir concave, C : Lentille convergente, D : Diaphragme, C' : Lentille de collection, HPVX-2 : Caméra ultra-rapide.

La synchronisation entre l'arrivée de la détonation sur la zone d'étude et l'enregistrement de la caméra se fait grâce à un décalage temporel appliqué à la caméra préalablement déclenchée par le signal électrique délivré par le capteur de pression en amont. La vitesse de la détonation a été préalablement déterminée (section 4.1).

### 3.4 Amorçage de la détonation

L'allumage du pré-mélange réactif est réalisé par brusque dépôt local d'énergie à l'extrémité de tube opposée à celle recevant la plaque d'enregistrement frontal (figure 3.1, F). La quantité déposée est fonction de la détonabilité, ici déterminée par la dilution à l'argon et par la pression initiale  $p_0$  : la détonabilité est d'autant plus faible que la dilution est grande ou que  $p_0$  est petite. En effet, ces deux sens de variations augmentent la largeur des cellules (2.4.2). Pour les faibles détonabilités, la combustion est amorcée par "fil explosé", *i.e.* par la sublimation d'un fil de cuivre durant la décharge d'un condensateur. Pour les plus grandes détonabilité, l'étincelle d'une bougie de moteur automobile à combustion interne suffit (fig. 3.1, A).

Cependant, pour nos mélanges, le positionnement au voisinage proche de l'amorçage d'une succession d'obstacles sous la forme d'une hélicoïde de cuivre, communément désignée par "spirale de Shchelkin" (S)), longue d'un mètre, a été nécessaire pour accélérer rapidement ce front de combustion initial, en provoquant de la turbulence et des interactions de chocs, et réduire ainsi considérablement sa distance de transition de la déflagration à la détonation (TDD), bien avant la section d'enregistrement.

### 3.5 Prémélanges réactifs

Les prémélanges réactifs utilisés pour les expériences sont constitués de dihydrogène  $H_2$  et de dioxygène  $O_2$  en proportions stoechiométriques, sans ou avec dilution par 40% en volume d'argon (Ar), soit  $2 H_2 + O_2$  et  $2 H_2 + O_2 + 2 Ar$ , respectivement.

Les stabilités et, donc, les régularités de leurs structures cellulaires motivent ce choix. Le mélange  $2 H_2 + O_2$  est du type irrégulier, le mélange  $2 H_2 + O_2 + 2 Ar$  du type régulier. Nous soulignons encore la difficulté associée à une décision de classification (section 2.4.2).

Les mélanges sont préparés en injectant individuellement les composants selon la méthode des pressions partielles dans des bouteilles de 20 litres préalablement vidées jusqu'à réaliser la pression finale de 4 bar.

Une pompe à vide aspire le gaz initialement présent dans le tube à détonation. Quand la pression résiduelle  $y$  est au moins inférieure à 0,05 kPa, le mélange réactif est injecté à la pression initiale  $p_0$  souhaitée. Toutes nos expériences ont été réalisées à la température initiale  $T_0 = 293 \pm 4$  K.

# Résultats expérimentaux et leurs analyses

---

## Sommaire

---

<b>4.1 Propagation de la détonation en tube droit . . . . .</b>	<b>40</b>
4.1.1 Structure cellulaire et géométrie du confinement . . . . .	40
4.1.2 Croisement d'ondes transverses . . . . .	53
4.1.3 Phases des ondes transverses en tube carré . . . . .	54
<b>4.2 Propagation de la détonation en tube de section croissante . . . . .</b>	<b>58</b>
4.2.1 Dynamiques sous-critique, critique et super-critique . . . . .	58
4.2.2 Études antérieures en tube de section croissante . . . . .	59
4.2.3 Effets transitoires et géométrie du confinement . . . . .	61
4.2.4 Atteinte du régime quasi-stationnaire . . . . .	64
<b>4.3 Diffraction et ré-amorçage de la détonation à travers un orifice . . . . .</b>	<b>67</b>
4.3.1 Paramètres d'étude . . . . .	68
4.3.2 Découplage choc/zone de réaction et échec de ré-amorçage . . . . .	69
4.3.3 Ré-amorçage par convergence de chocs . . . . .	69
4.3.4 Ré-amorçage par réflexion de choc sur la paroi . . . . .	71
4.3.5 Ré-amorçage par Transition Déflagration-Détonation . . . . .	71
4.3.6 Transmission de la détonation . . . . .	71
4.3.7 Comportement selon la forme de la section . . . . .	71
<b>4.4 Conclusion sur l'influence de la géométrie du confinement . . . . .</b>	<b>83</b>

---

Ce chapitre décrit et analyse nos résultats expérimentaux.

Les sections 4.1 et 4.2 portent sur l'influence du confinement sur la propagation quasi-stationnaire en tubes de section constante ou croissante de la détonation.

La section 4.3 donne un exemple des répercussions de cette influence sur la phénoménologie du réamorçage d'une détonation initialement autonome après sa diffraction par un obstacle perforée.

La section 4.4 résume nos observations expérimentales.

## 4.1 Propagation de la détonation en tube droit

Les résultats sont présentés par mélange et par ordre croissant de pression initiale  $p_0$ .

### 4.1.1 Structure cellulaire et géométrie du confinement

Les figures 4.1, 4.2 et 4.3 montrent des enregistrements frontaux et longitudinaux de la structure de détonations dans les mélanges  $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 2\text{Ar}$  et  $2\text{H}_2 + \text{O}_2$  à différentes pressions initiales  $p_0$ .

Pour le mélange  $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 2\text{Ar}$ , aux faibles pressions initiales, de  $p_0 = 15$  à  $20$  kPa, les enregistrements frontaux (agrandis figures 4.4 à 4.6) en tube carré montrent une distribution de rectangles et de carrés dont la répartition, le rapport d'aspect et la taille dépendent du moment d'impact de la détonation sur la plaque d'enregistrement (section 4.1.3). Au contraire, les distributions de formes des motifs dans les tubes triangulaire et rond sont stochastiques, et les expériences répétées ne montrent aucune dépendance de ces formes à l'instant d'impact. Bien que le comptage soit difficile, un front de détonation dans un tube rond semble contenir moins de cellules que dans les tubes triangulaire et carré pour une même  $p_0$ . Les enregistrements longitudinaux montrent des cellules plus irrégulières dans les tubes triangulaire et rond que dans le tube carré, ce que confirment les densités de distribution figure 4.8. Elles sont également plus fines, pour une longueur semblable, dans le tube carré où l'on peut observer un espacement régulier des impacts de réflexion des fronts transversaux se déplaçant parallèlement à la plaque longitudinale (sous-section 4.1.3).

Aux pressions initiales intermédiaires, de  $p_0 = 20$  à  $70$  kPa (figure 4.7), de petits domaines de déformation des motifs rectangulaires apparaissent sur les enregistrements frontaux dans le tube carré avec des formes complexes similaires à celles des enregistrements en vue frontale dans les autres tubes. Ces domaines ont une distribution stochastique et s'étendent avec l'augmentation de  $p_0$ . Cependant, les enregistrements longitudinaux dans le tube carré montrent toujours un espacement régulier des impacts transversaux. L'irrégularité des cellules est qualitativement similaire d'un tube à l'autre (figure 4.8).

À des pressions initiales plus élevées, à partir de  $p_0 = 70$  kPa (figure 4.2), les domaines irréguliers en vue frontale dans le tube carré couvrent toute la section du tube. Les enregistrements de vue frontale sont identiques quelle que soit la forme de la section. Ils présentent la même complexité sans symétries locale et globale évidentes. Les enregistrements longitudinaux dans le tube carré ont également le même aspect que dans les tubes

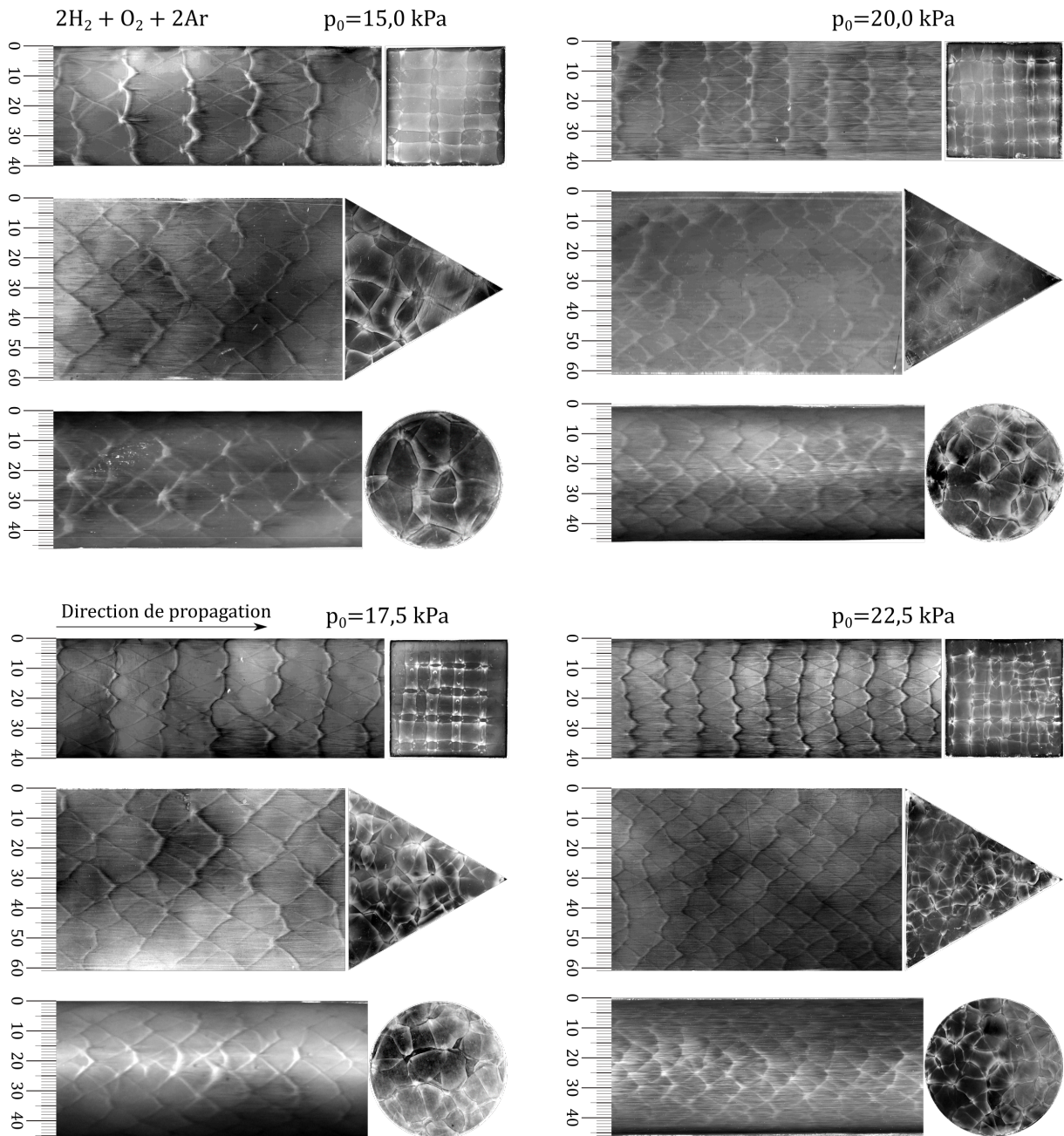


FIGURE 4.1 – Enregistrements frontaux et longitudinaux sur dépôt de carbone de la structure cellulaire de détonations dans les prémélanges  $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 2\text{Ar}$  dans les tubes carré, rond et triangulaire de  $16 \pm 4\% \text{ cm}^2$ .

triangulaire et rond. En particulier, les enregistrements longitudinaux ne montrent plus les lignes attestant de la présence d'ondes transversales se déplaçant perpendiculairement aux parois du tube.

Pour le mélange  $2\text{H}_2 + \text{O}_2$  (figure 4.3), les enregistrements montrent une irrégularité frontale pour chaque pression initiale testée, dans le tube rond comme dans le tube carré. Les enregistrements longitudinaux obtenus dans le tube carré, montrent cependant les traces d'ondes transverses perpendiculaires à la plaque de dépôt de carbone s'imprimant

quasi-périodiquement. Elles montrent aussi que l'onde de détonation n'est pas aussi plane que dans le mélange  $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 2\text{Ar}$ . Les cellules sont longitudinalement plus irrégulières, comme le montrent les distributions dans la figure 4.8.

Les enregistrements permettent deux autres observations. La première est le résultat paradoxal selon lequel les motifs longitudinaux sont réguliers même si les motifs frontaux ne le sont pas, quelle que soit la géométrie du tube. La seconde est que les cellules sont plus minces dans le tube carré que dans les tubes triangulaire et ronds.

Bien que peut-être limitée aux mélanges  $2\text{H}_2 + \text{O}_2$  et  $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 2\text{Ar}$ , cette évolution inverse contribue à la discussion des conditions de représentativité par une longueur unique de cellule de détonation.

Néanmoins, la figure 4.9 montre les largeurs moyennes des cellules  $\bar{\lambda}_C$  des enregistrements longitudinaux pour chaque forme et aire de section transversale en fonction de la pression initiale  $p_0$ . Les largeurs ont été définies classiquement comme les plus grandes distances entre deux ondes transversales projetées perpendiculairement à la direction moyenne du choc incident [89, 93]. Les moyennes apportées par cette étude sont calculées à partir d'au moins 24 mesures le long de chaque enregistrement, et l'incertitude résultante correspond approximativement à la taille des marqueurs sur la figure. Ces moyennes suivent la tendance connue de la diminution de  $\bar{\lambda}_C$  avec l'augmentation de  $p_0$  quelle que soit la forme de la section transversale et, si  $p_0 > 25 \sim 30$  kPa, elles suivent la relation d'approximation  $\bar{\lambda}_C \propto p_0^\alpha$ ,  $1.1 \leq \alpha \leq 1.3$  bien connue [67]. Leurs différences d'un tube à l'autre diminuent également avec l'augmentation de  $p_0$ .

Pour le mélange  $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 2\text{Ar}$ , la différence entre tubes rond et carré augmente progressivement avec la diminution de  $p_0$  à partir de 20 kPa alors que celle entre le tube triangulaire et le tube rond est plus abrupte à environ 15 kPa. Les largeurs de cellules dans le tube rond sont les plus grandes, celles dans le tube carré les plus petites.

Deux interprétations sont possibles. La première est qu'aucune symétrie ne peut résulter à long terme des réflexions obliques nécessairement complexes des ondes transversales sur les parois des tubes ronds et triangulaires [106, 124]. La seconde est l'existence d'une couche limite au niveau des parois. Cependant, plusieurs éléments infirment cette dernière hypothèse. Premièrement, le modèle de FAY [125, 126] reproduit au moins qualitativement l'augmentation de l'épaisseur de la couche limite avec la diminution de  $p_0$ . Sous l'effet de la couche limite, la vitesse d'écoulement est plus faible aux parois. La couche limite agit comme un puits de masse qui augmente localement la masse spécifique  $\rho$ . L'écoulement à l'aval du choc est donc divergent ; le front moyen est par conséquent courbé et se propage

avec un déficit de vitesse [127-129]. Courbure et déficits doivent ainsi augmenter avec l'épaisseur de la couche limite. Cette description s'applique aux détonations cellulaires si la largeur des cellules est suffisamment petite par rapport aux dimensions transversales des tubes pour qu'une surface moyenne lisse représente bien le front de détonation. D'après la figure 4.9, cet effet devrait alors être plus prononcé dans le tube rond que dans le tube carré puisque les cellules de détonation sont plus larges si la température du choc, donc la vitesse de détonation, est plus faible. La figure 4.10 montre les vitesses moyennes de détonation  $\bar{D}$  dans les tubes rond et carré de 16 cm<sup>2</sup> de section en fonction de  $p_0$ , selon le mélange. Quelle que soit la dilution à l'argon, la vitesse estimée est plus faible dans le tube rond que dans le tube carré. Cependant, la vitesse dans le tube rond est systématiquement  $\approx 5\%$  plus faible que dans le tube carré, et ce indépendamment de  $p_0$ .

Dans la limite des grandes sections transversales, l'épaisseur de la couche limite, notée  $\delta$ , doit être indépendante de la forme des sections et négligeable par rapport aux dimensions transversales des tubes, à savoir ici le rayon  $R$  du tube rond et le côté  $a$  du tube carré. Les aires de section des tubes sont, respectivement,  $A_R = \pi(d/2)^2$  et  $A_C = a^2$ , celles réduites par la couche limite sont,  $A'_R = A_R(1 - 2\delta/d)^2$  et  $A'_C = A_C(1 - 2\delta/a)^2$ . Si  $A_R = A_C$ , alors :

$$\frac{A'_C}{A'_R} = \left( \frac{1 - 2\varepsilon}{1 - \sqrt{\pi\varepsilon}} \right)^2, \quad (4.1)$$

avec  $\varepsilon = \delta/a < 1$ . Ainsi, l'aire effective de section devrait être plus grande dans le tube rond que dans le tube carré et décroître plus lentement avec une couche limite croissante. Or, la figure 4.9 montre la tendance inverse, et la différence augmente avec une décroissance de  $p_0$ . Cette observation suggère que l'établissement de la couche limite se fait en dehors de la zone de réaction. L'hypothèse la plus favorisée est celle de la complexité croissante du jeu d'ondes, induite par la diversité des angles de réflexion des ondes transverses sur les parois du tube rond et triangulaire, puis de leurs collisions entre elles. Ces considérations ne s'appliquent qu'à la détonation en propagation et non aux phénomènes de TDD.

La convergence des valeurs de  $\bar{\lambda}_C$  et l'irrégularité des enregistrements frontaux semblent, pour le mélange  $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 2\text{Ar}$ , se faire à partir de la même pression initiale  $p_0 = 70$  kPa pour les tubes de section 16 cm<sup>2</sup>. Pour les tubes de section plus élevée, cette pression initiale limite semble être plus faible. Pour le mélange  $2\text{H}_2 + \text{O}_2$ , la convergence se fait vers  $p_0 > 100$  kPa.

Il est connu depuis longtemps que la dimension transversale du tube influence la dynamique cellulaire et de propagation de la détonation, d'autant plus qu'il y a peu de cellules sur le front en fonction de  $p_0$  et  $T_0$  [25, 73, 130]. Inversement, plus les cellules sont petites, plus elles sont indépendantes du tube et plus la contribution de la cinétique



chimique est prépondérante. [67, 106]. Par exemple, la divergence croissante de  $\bar{\lambda}_C$  avec la diminution de  $p_0$  a été notée par STREHLOW et ENGEL [93] lorsqu'ils ont comparé leurs mesures à celles de VOITSEKHOVSKII [104]. De même, KUMAR et DEWIT [20, 131] ont noté l'augmentation de la différence entre leurs mesures et les largeurs de cellules théoriques avec la diminution de  $p_0$ . Ils ont évoqué à la fois les problèmes de mesure et l'influence de la taille du tube car leur modélisation n'impliquait que la vitesse et le rapport de chaleur spécifique après le choc, la température initiale et le temps d'induction.

Nous en déduisons que l'influence de la géométrie d'un tube sur la propagation de la détonation est essentiellement liée au nombre  $F$  de cellules sur le front [106]. Nous estimons cette limite à au moins  $\mathcal{O}(100)$  cellules pour les mélanges étudiés ici.

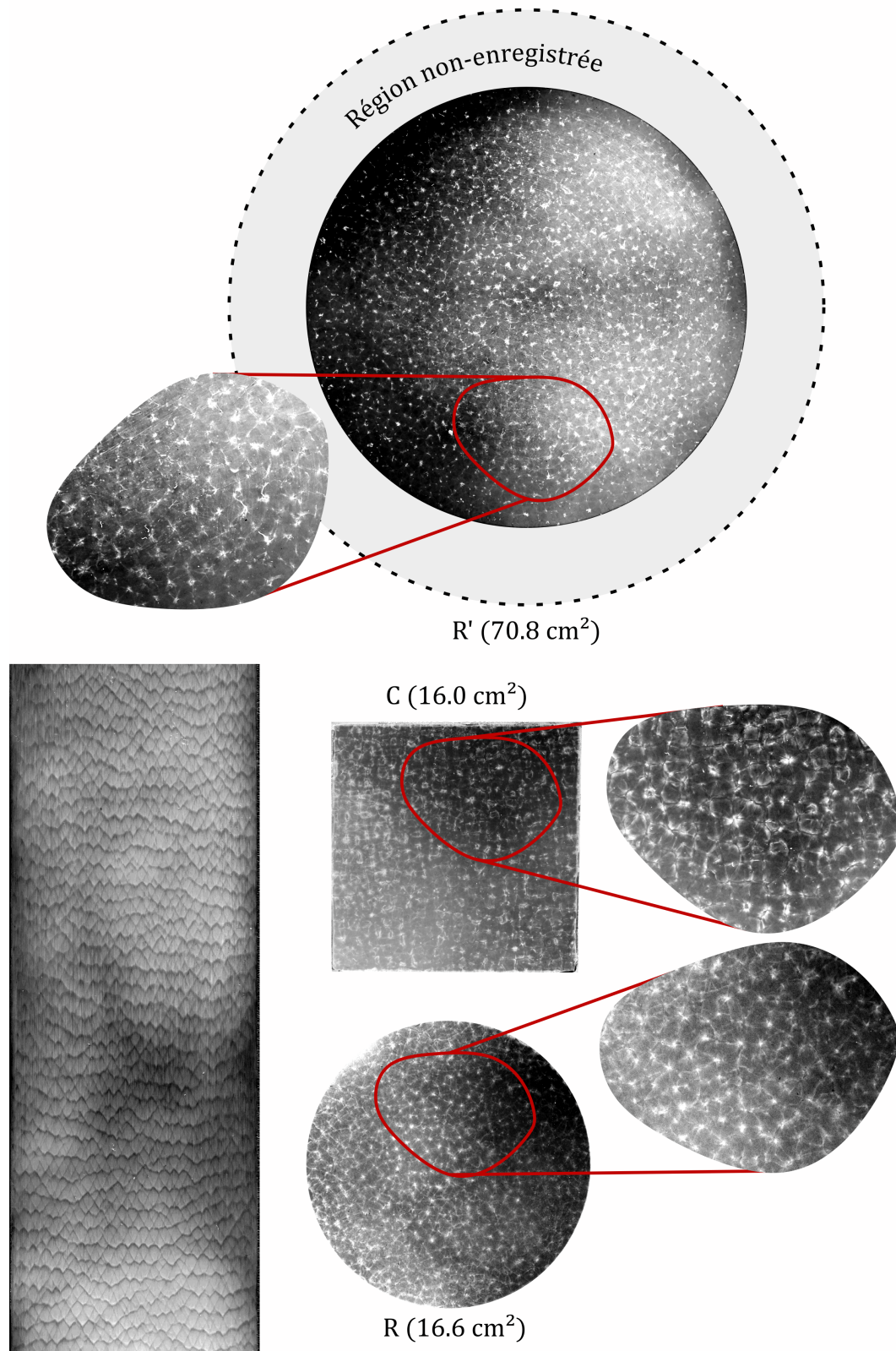


FIGURE 4.2 – Enregistrements frontaux et longitudinaux sur dépôt de carbone de structures cellulaires de détonations dans le prémélange  $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 2\text{Ar}$  à  $p_0 = 70\text{ kPa}$  dans les tubes R, C et R'.

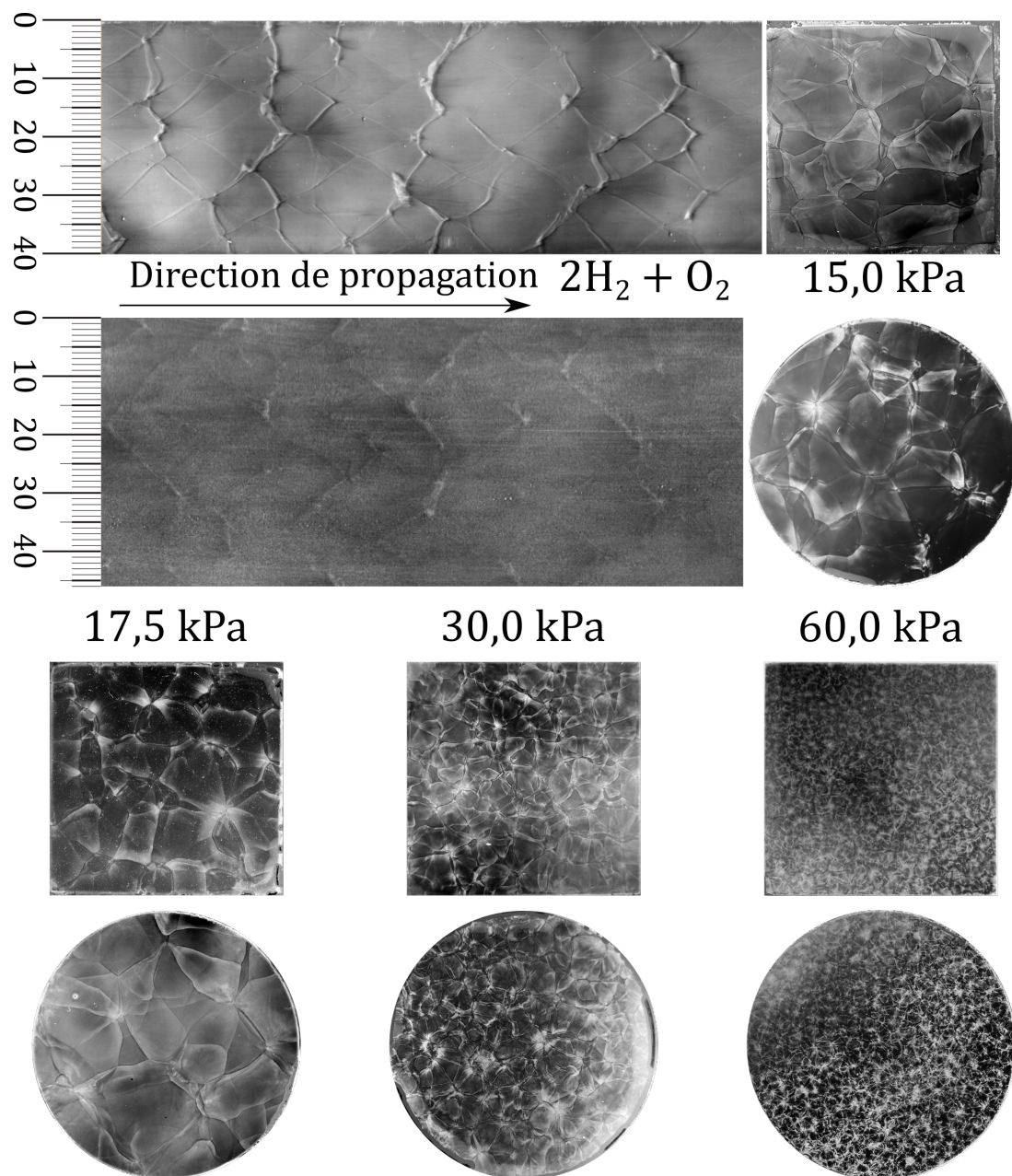


FIGURE 4.3 – Enregistrements frontaux et longitudinaux sur dépôt de carbone de structures cellulaires de détonations dans le prémélange  $2\text{H}_2 + \text{O}_2$  dans les tubes C et R.

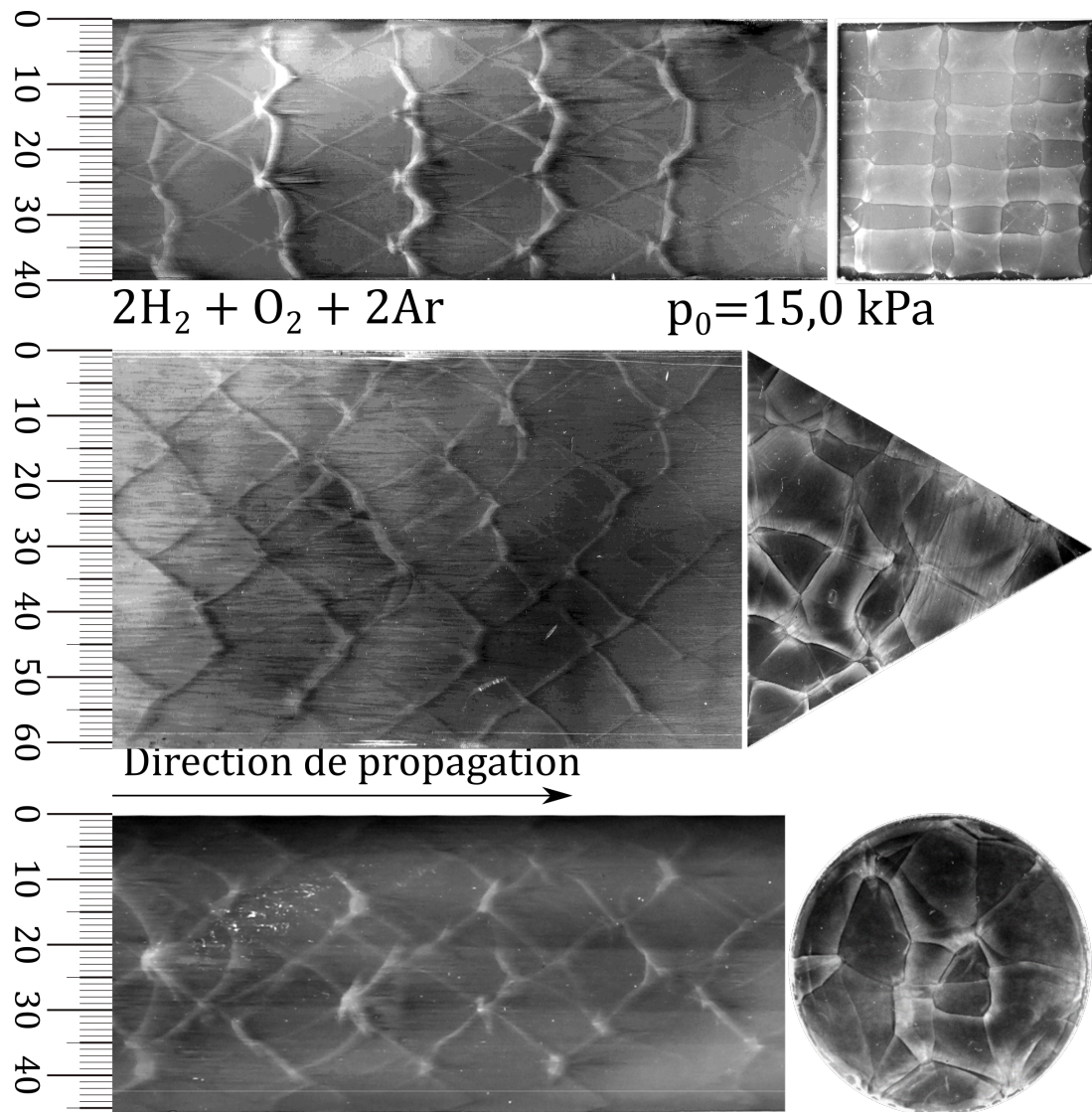


FIGURE 4.4 – Enregistrements frontaux et longitudinaux sur dépôt de carbone de structures cellulaires de détonations dans le prémélange  $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 2\text{Ar}$  à  $p_0 = 15 \text{ kPa}$  dans les tubes carré, triangulaire et rond de  $16 \text{ cm}^2$ .

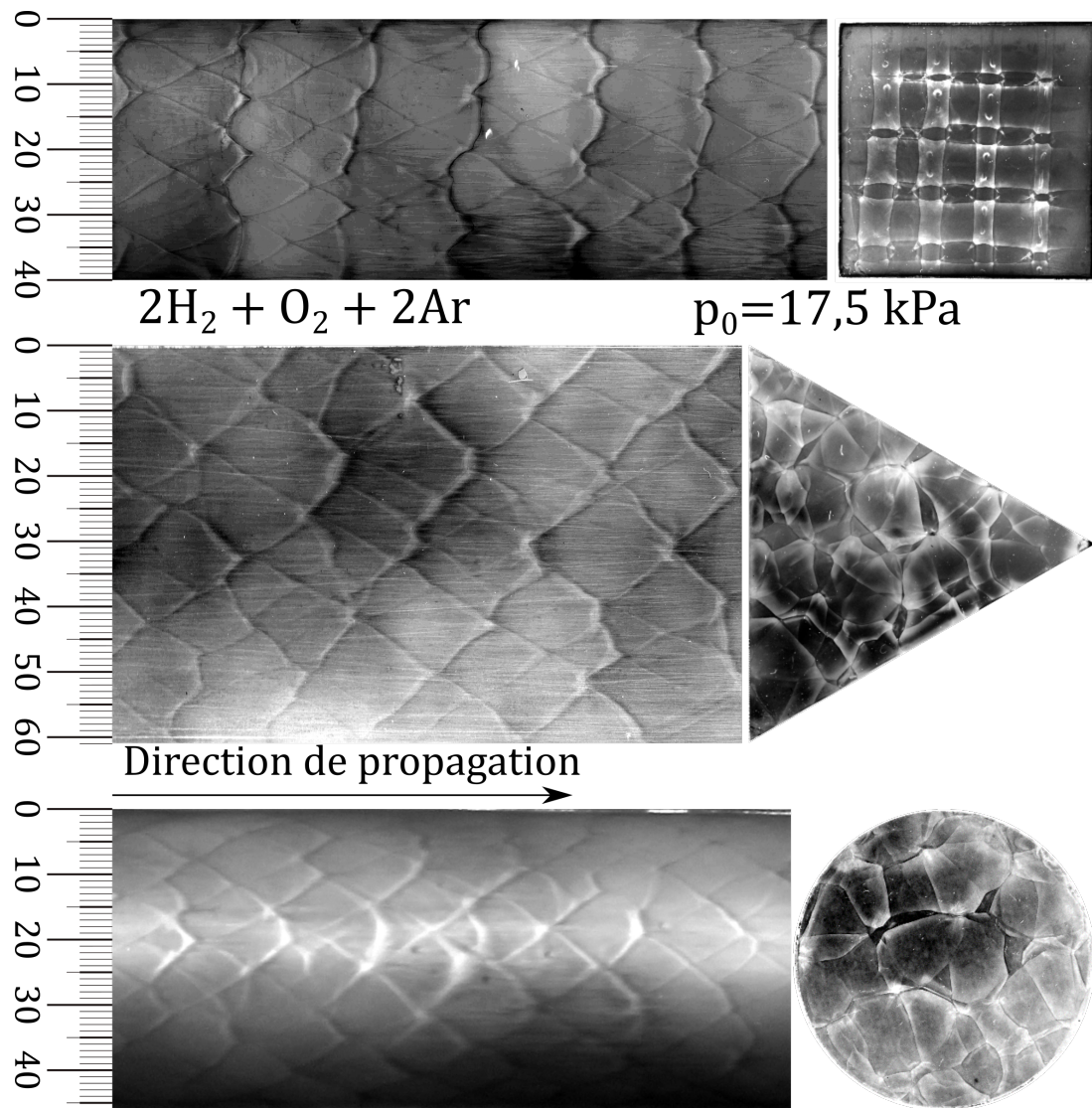


FIGURE 4.5 – Enregistrements frontaux et longitudinaux sur dépôt de carbone de structures cellulaires de détonations dans le prémélange  $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 2\text{Ar}$  à  $p_0 = 17,5 \text{ kPa}$  dans les tubes carré, triangulaire et rond de  $16 \text{ cm}^2$ .

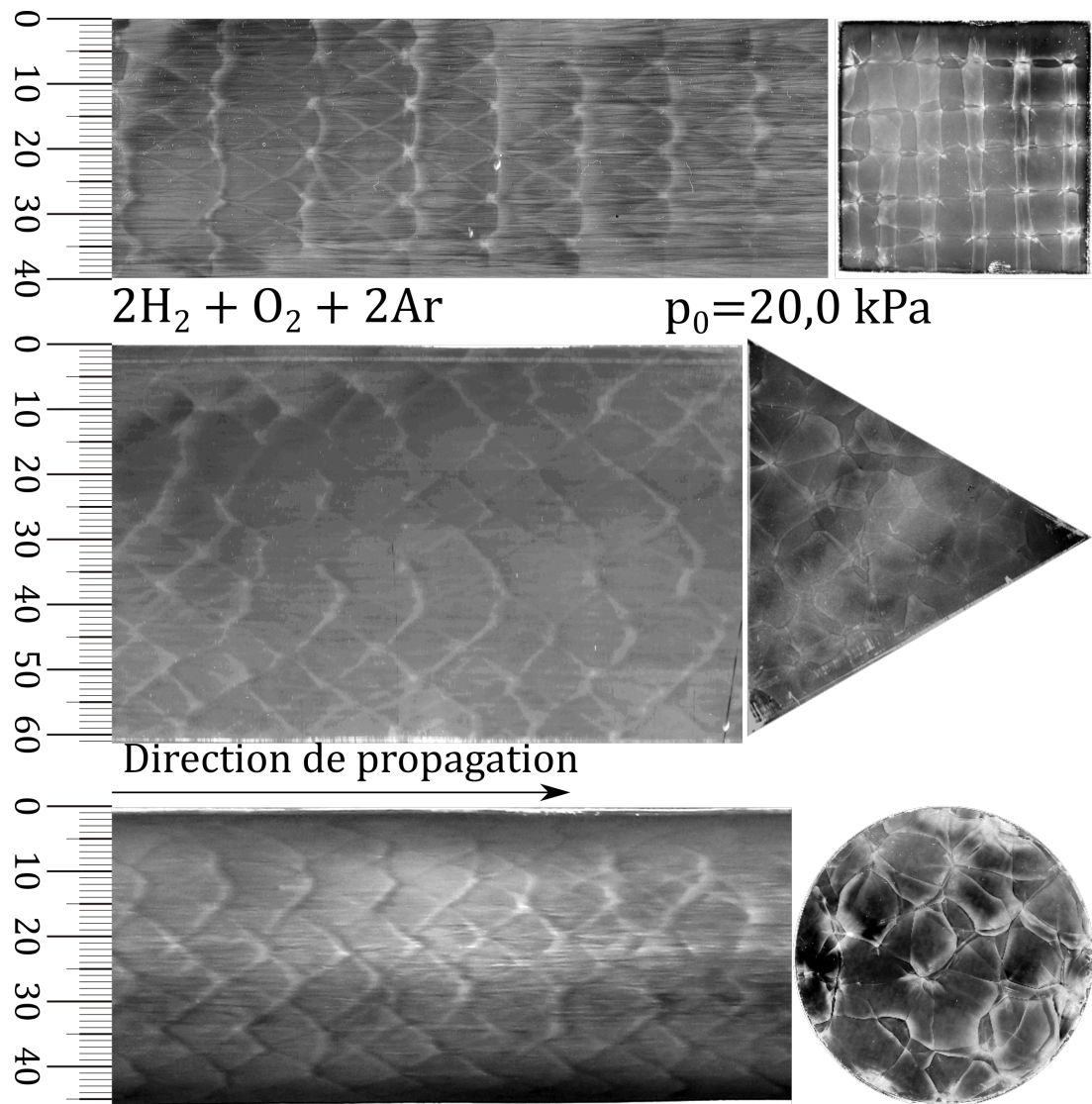


FIGURE 4.6 – Enregistrements frontaux et longitudinaux sur dépôt de carbone de structures cellulaires de détonations dans le prémélange  $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 2\text{Ar}$  à  $p_0 = 20 \text{ kPa}$  dans les tubes carré, triangulaire et rond de  $16 \text{ cm}^2$ .

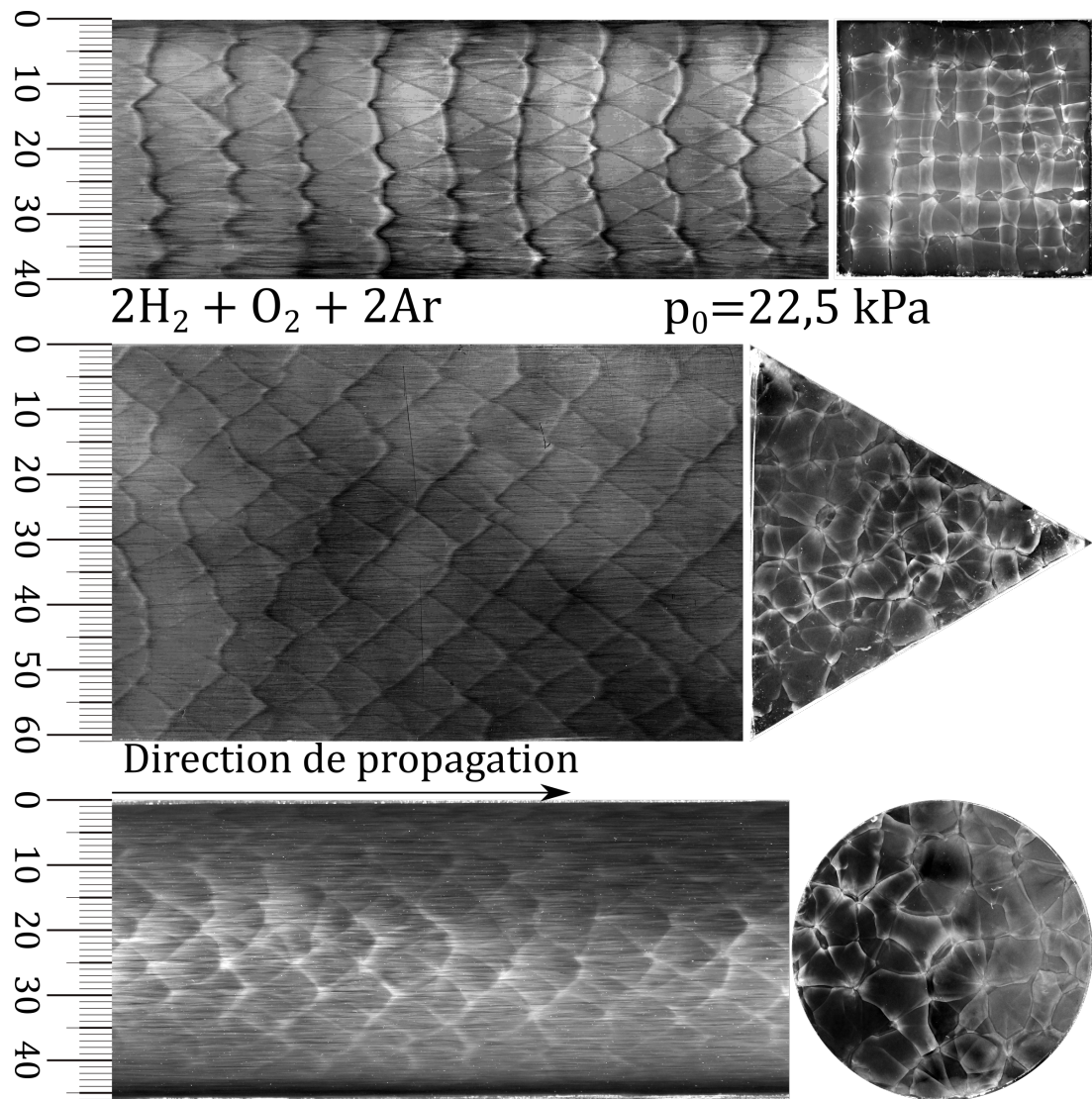


FIGURE 4.7 – Enregistrements frontaux et longitudinaux sur dépôt de carbone de structures cellulaires de détonations dans le prémélange  $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 2\text{Ar}$  à  $p_0 = 22,5 \text{ kPa}$  dans les tubes carré, triangulaire et rond de  $16 \text{ cm}^2$ .

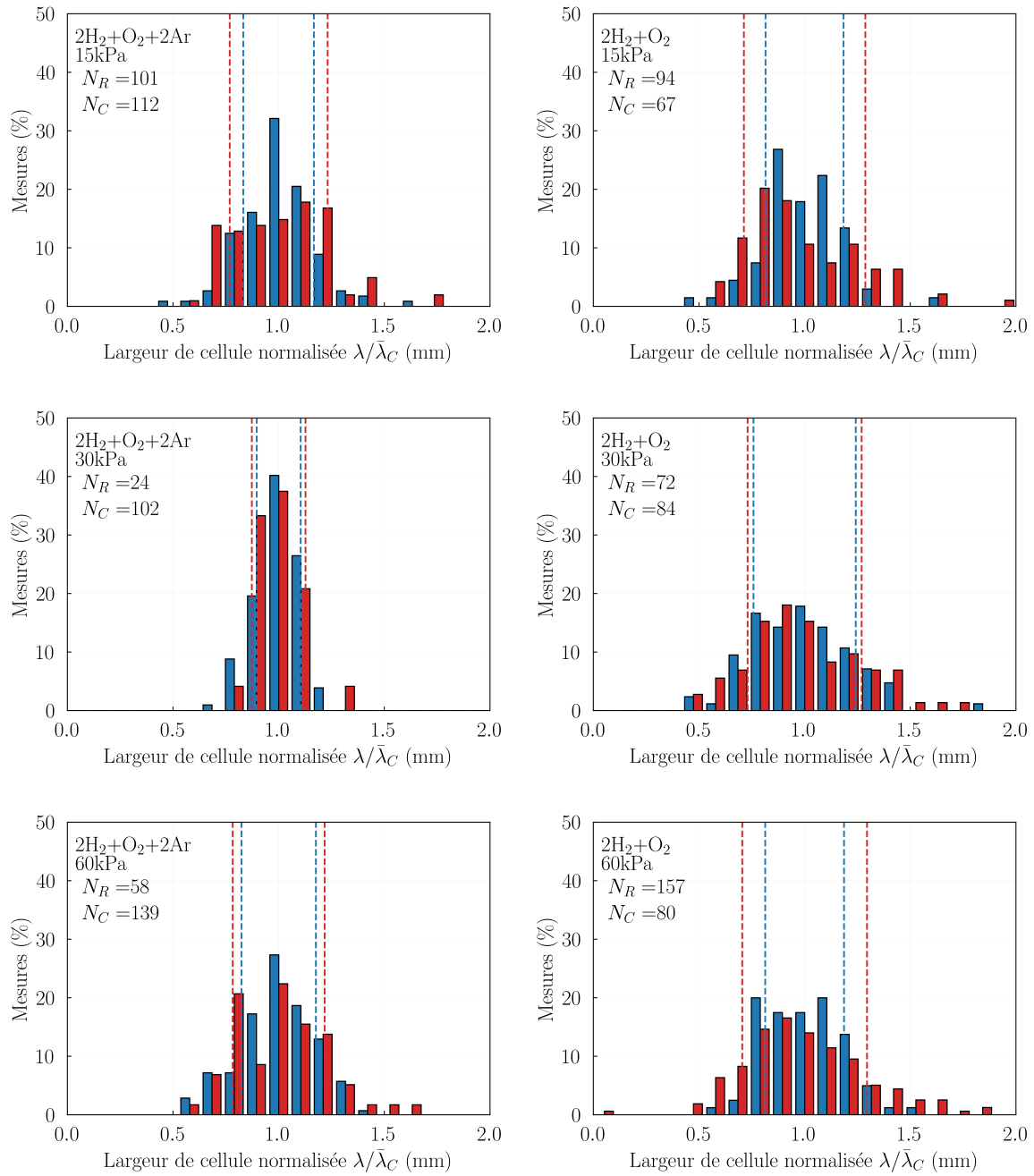


FIGURE 4.8 – Distribution des tailles de cellule normalisées  $\lambda/\bar{\lambda}_C$  mesurées dans les tubes R (rouge) et C (bleu) selon la dilution à l'argon et  $p_0$ .  $N_C$  et  $N_R$  : nombre de cellules mesurées. Les bandes bornées par les traits pointillés contiennent 68,2% des cellules.



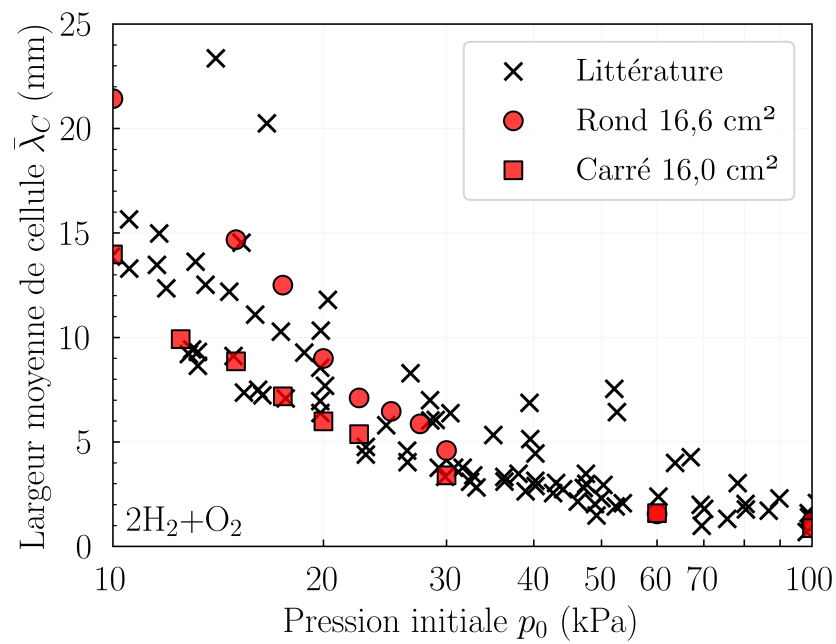
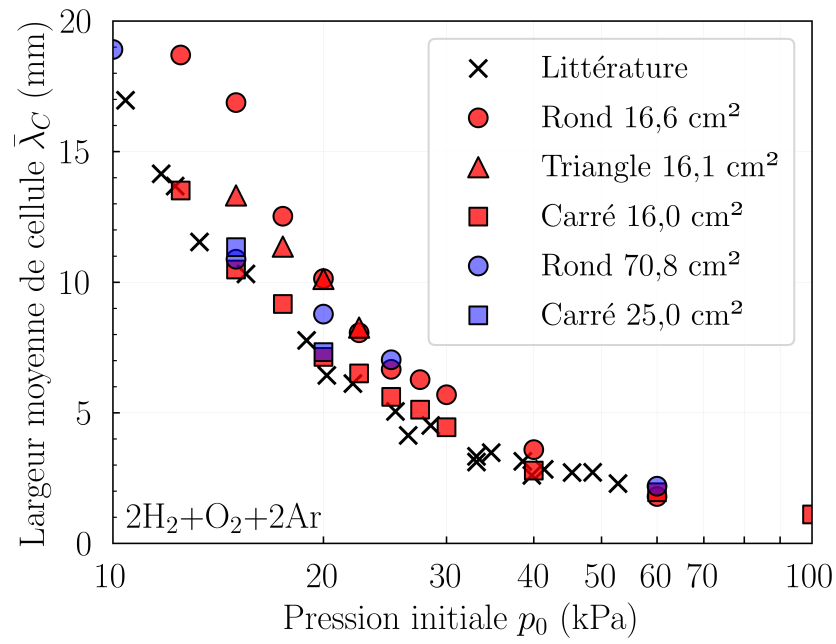


FIGURE 4.9 – Moyennes  $\bar{\lambda}_C$  des largeurs de cellules de détonation dans les prémélanges  $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 2\text{Ar}$  (haut) et de  $2\text{H}_2 + \text{O}_2$  (bas) mesurées sur les enregistrements longitudinaux dans différents tubes, en fonction de la pression initiale  $p_0$  et de la section de tube.

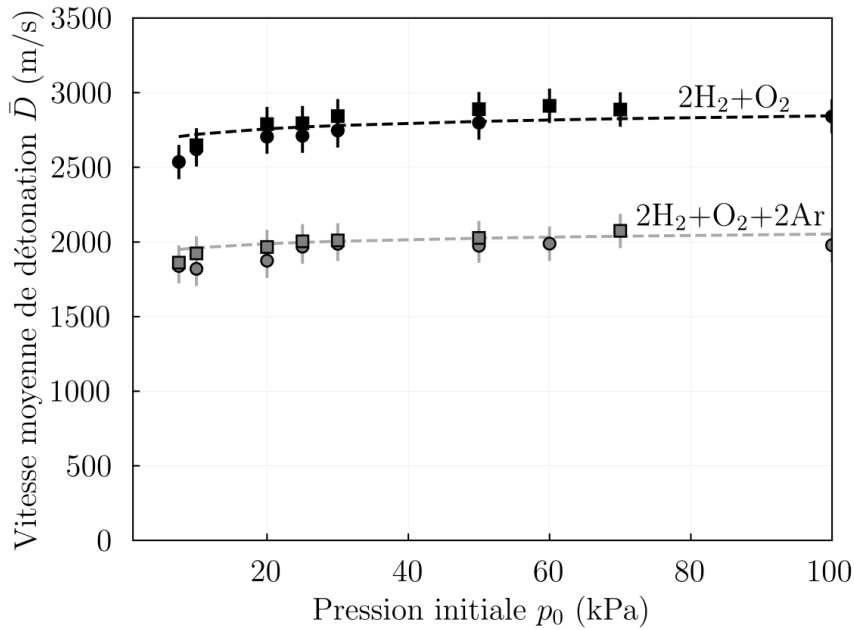


FIGURE 4.10 – Vitesses moyennes de détonation  $\bar{D}$  dans les tubes rond ( $\circ$ ) et carré ( $\square$ ) de section  $16 \text{ cm}^2$  en fonction de  $p_0$  et de la dilution à l'argon. Les barres d'erreurs sont estimées à  $115 \text{ m/s}$  [132]. Les pointillés indiquent les vitesses CJ.

### 4.1.2 Croisement d'ondes transverses

Une observation importante est relative à la phénoménologie de la dynamique est celle du lieu de croisement de deux ondes, apparemment normales l'une à l'autre. Nous montrons l'existence d'une troisième onde transverse, plus forte, comme illustré figure 4.11.

Chaque onde transverse se propage en partie dans un milieu pré-choqué par l'autre onde, *i.e.* dans un milieu hétérogène. Ces états choqués sont les états initiaux des ondes transverses. Ils sont différents pour chacune, ce qui induit un gradient de vitesse de propagation et donc l'existence d'une onde transverse plus puissante. Les cellules régulières dans les tubes carrés sont donc, vues de face, des octogones et non des rectangles. Plus généralement, l'existence de points de convergence de quatre ondes transverses ou plus est fortuite : leur temps d'existence est négligeable devant le temps caractéristique d'une cellule complète. Ainsi, les points de convergence d'ondes transverses ne présentent, en général, que trois ondes.

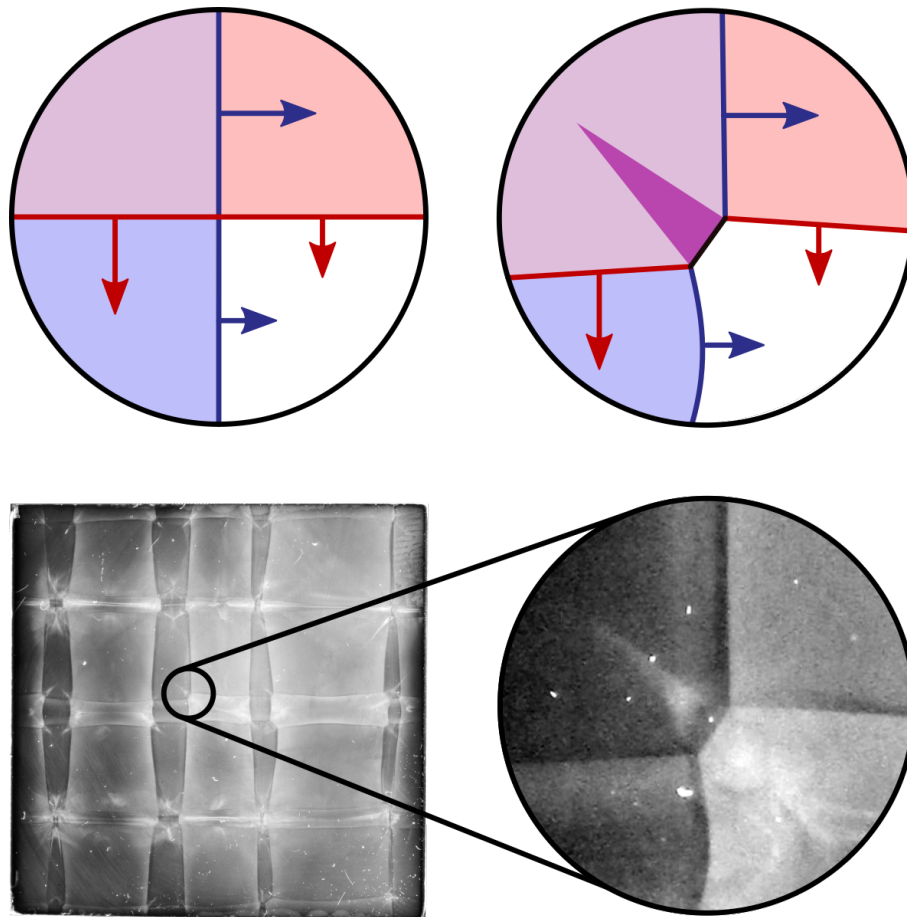


FIGURE 4.11 – Agrandissement d’un croisement d’ondes transverses démontrant l’absence de points quadruples.

### 4.1.3 Phases des ondes transverses en tube carré

Nous avons effectué une analyse détaillée de la propagation de la détonation dans des tubes à section carrée avec  $p_0$  suffisamment basse pour que les ondes transversales se déplacent approximativement parallèlement et perpendiculairement aux parois du tube (section 4.1.1). Nous avons déduit des niveaux de gris sur les enregistrements frontaux la direction de propagation des ondes transversales, soit des domaines les plus clairs vers les domaines les plus sombres où les particules de carbone n’ont pas encore été balayées par les ondes (figure 4.12).

Nous avons ainsi identifié un continuum de modes de propagation rectangulaires. La figure 4.13 montre un schéma de la structure cellulaire d’une détonation marginale dans  $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 2\text{Ar}$ . Les coordonnées  $x$  et  $y$  désignent les directions transversales, et  $z$  la direction longitudinale, c’est-à-dire celle de la propagation de la détonation. Un seul enregistrement longitudinal permet d’identifier les deux séries d’ondes transversales définissant un mode rectangulaire, l’une par les motifs en forme de diamant, l’autre

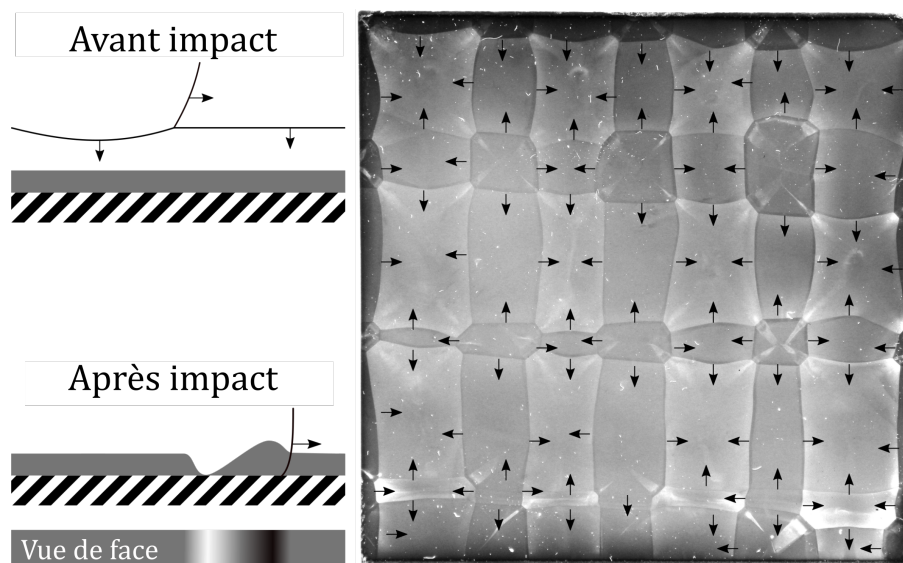


FIGURE 4.12 – Gauche : vue en coupe et de face du dépôt de carbone avant et après impact de l’onde de détonation. Droite : enregistrement frontal avec les directions des ondes transverses à l’instant d’impact. ( $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 2\text{Ar}$ ,  $p_0 = 15.0\text{ kPa}$ )

par les impacts périodiques des fronts transversaux se déplaçant parallèlement à surface d’enregistrement.

La distance entre les positions longitudinales des impacts des ondes transversales dans les directions  $x$  et  $y$  définit le déphasage  $\varphi$  entre les jeux d’ondes transverses, comme indiqué sur la figure 4.13. Ses valeurs minimale et maximale sont respectivement de 0 et d’une demi-longueur de cellule  $0 \leq \varphi \leq L_C/2$ , où  $L_C$  est la longueur de la cellule. Cette définition généralise aux régimes multicellulaires les études de régimes marginaux numériques de Williams et al. [108] et expérimentales de Hanana et al. [109].

Le cas  $\varphi = 0$  est celui pour lequel les jeux d’ondes transversales sont en phase, avec leurs impacts respectifs sur les parois adjacentes du tube à la même position  $z$  (figure 4.14 gauche, position d’impact  $z_2$ ). Les diagonales et les normales aux parois passant par le centre de la section de tube sont des lignes de symétrie du front cellulaire indépendamment du temps. Chaque cellule a un centre fixe dans le temps. Une cellule sur deux est de section carrée de taille variant périodiquement entre 0 et  $\lambda$ . L’autre cellule est un rectangle dont le rapport d’aspect oscille entre 0 et  $+\infty$ .

Le cas inverse correspond à des jeux d’ondes transversales en opposition de phase :  $\varphi_{max} = L_C/2$ , (figure 4.14, droite). Comme dans le cas précédent, les centres des cellules ont des positions fixes, mais il y a une alternance dans le temps des cellules carrées et rectangulaire. Il n’y a plus de lignes de symétrie mais la structure frontale semble tourner de  $\frac{\pi}{2}$  chaque intervalle de temps nécessaire à une propagation longitudinale de  $L_C/2$ . Dans la figure 4.14 droite, cela correspond aux positions  $z_1$  et  $z_3$ , et  $z_2$  et  $z_4$ .

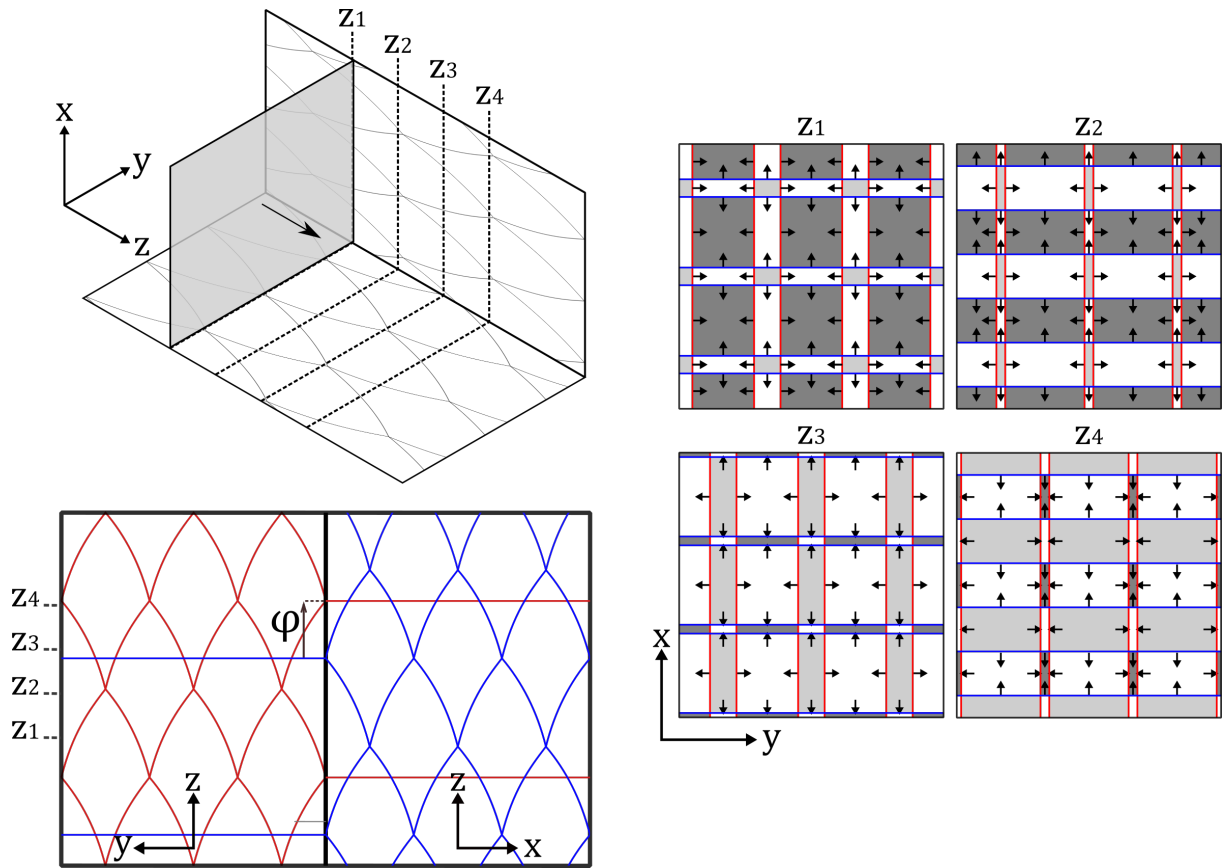


FIGURE 4.13 – Schéma de la structure d'une détonation marginale de  $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 2\text{Ar}$  en tube carré à déphasage arbitraire  $0 < \varphi < \varphi_{\max}$ .

Les résultats expérimentaux, *e.g.*, figure 4.15, montrent une variation continue du déphasage le long des enregistrements longitudinaux.

Les enregistrements frontaux montrent donc des cellules rectangulaires vues de face dans la majorité des cas, soit des déphasages quelconques. L'interprétation est que la détonation est sujette à des instabilités de grandes longueurs d'onde et de faibles amplitudes - devant les dynamiques cellulaires - qui déforment le front de détonation. Le front de détonation est gauchi, d'où l'évolution du déphasage. Cette variation pourrait résulter d'une instabilité intrinsèque du mode rectangulaire qui croît avec l'augmentation du nombre de cellules, c'est-à-dire  $p_0$  (section 4.1), et des imperfections du système et de l'allumage, ainsi que de petits défauts sur la paroi du tube et une forme asymétrique du front d'onde en sortie de la spirale de Shchelkin. Ainsi, la phase et son décalage sont difficiles à identifier et à mesurer avec précision, et apparaissent essentiellement comme des concepts limités à un système d'allumage, un tube et un front de détonation cellulaire idéaux, c'est-à-dire ni inclinés, ni courbés, ni déformés.

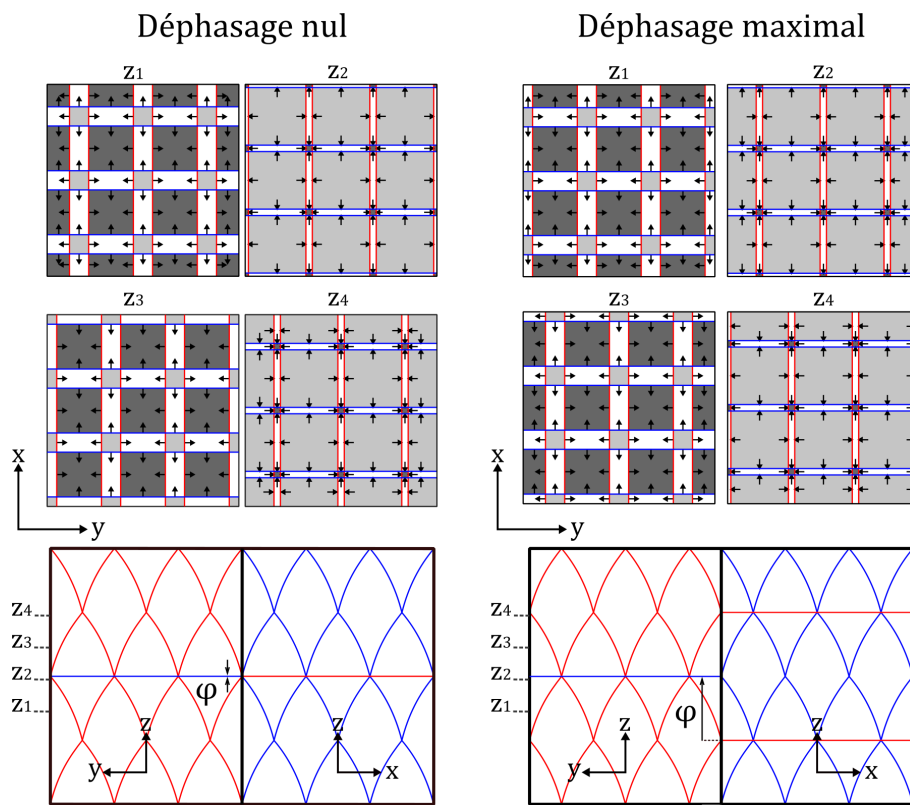


FIGURE 4.14 – Schémas de la structure cellulaire d'une détonation marginale en tube carré à déphasage nul ( $\varphi = 0$ ) et maximal ( $\varphi = \varphi_{\max}$ ).

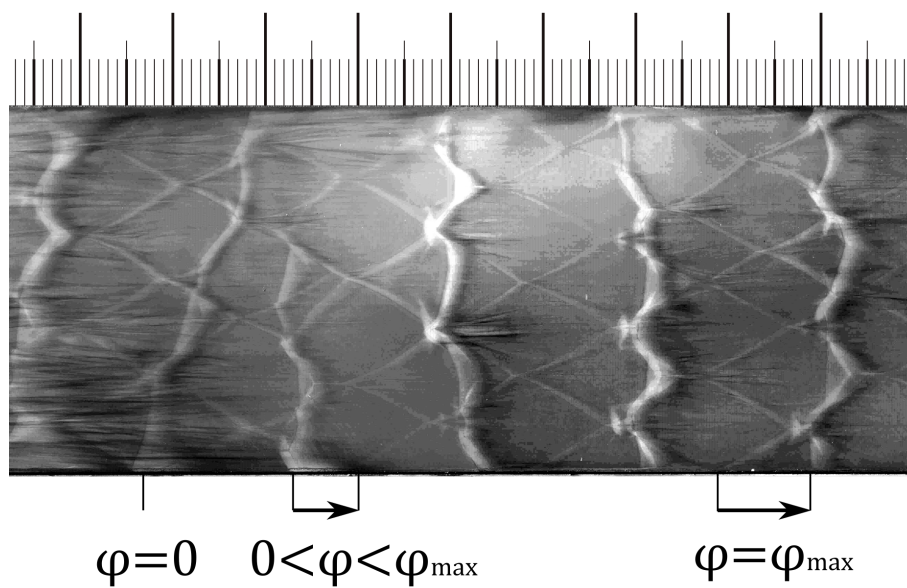


FIGURE 4.15 – Exemple de l'évolution du déphasage sur un enregistrement longitudinal de détonation dans  $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 2\text{Ar}$  à  $p_0 = 20\text{ kPa}$ .

## 4.2 Propagation de la détonation en tube de section croissante

Dans la section 4.1, nous avons étudié la dynamique de la structure cellulaire d'une détonation se propageant dans des tubes de sections constantes en fonction de la forme, ronde ou carrée, et de l'aire  $A$  des sections et de la pression initiale  $p_0$ . Nous avons en particulier observé que l'influence de la forme de la section diminue avec l'augmentation de l'un ou l'autre paramètre du couple  $(A, p_0)$  jusqu'à devenir négligeable, ce qui se traduit par l'indépendance des tailles, formes et régularité des cellules si leur nombre  $F$  par unité de surface du front est suffisamment grand.

Dans cette section, nous étudions la dynamique de la structure cellulaire d'une détonation se propageant dans des tubes de section  $A$  croissante. Nous analysons en particulier l'influence de la forme ronde ou carrée des sections. Nous avons considéré une seule pression initiale  $p_0 = 20$  kPa.

### 4.2.1 Dynamiques sous-critique, critique et super-critique

De manière générale, les comportements dynamiques, transitoires, d'une détonation sont associés à ses phases d'amorçage ou à sa réaction à des modifications de ses conditions de propagation. Ils peuvent être classés en trois catégories, désignées par supercritique, critique ou sous-critique. Par exemple, dans le cas d'une détonation initialement auto-entretenu (*e.g.*, Section 4.1), le comportement transitoire peut être provoqué par une perturbation ou une variation de la composition initiale [132] ou une modification de la géométrie du confinement (transmission dans un grand volume [133], propagation à travers un tube courbé [134], *etc*). Le comportement super-critique est une transmission continue de la détonation, sans zone de découplage de la combustion et de l'onde de choc. La structure cellulaire est continûment présente avec éventuellement des variations de largeur moyenne des cellules ou leurs disparitions localisées dans les zones de plus fortes expansions. Le comportement critique est une transmission indirecte de la détonation, *i.e.*, avec extinction totale de la détonation mais toujours suivie de son ré-amorçage. La structure cellulaire est discontinue. Les ondes de choc et de combustion se découplent puis se recouplent. Le comportement sous-critique est l'extinction totale de la détonation sans ré-amorçage. La structure cellulaire disparaît définitivement.

### 4.2.2 Études antérieures en tube de section croissante

La transmission d'une détonation se propageant dans un tube vers un grand volume, par saut (*e.g.* [135-138]) ou par variation continue d'aire (conduite conique), a fait l'objet de nombreuses études. Elles présentent essentiellement les mêmes ensembles de comportements : super-critique, critique et sous-critique. KNYSTAUTAS *et al.* [139] ont établi que le diamètre du tube doit être au moins 10 à 13  $\bar{\lambda}_C$  pour assurer une transmission critique par saut à un grand volume. KOGARKO [140] a analysé les phénomènes de transmission d'une détonation d'un tube droit vers un tube conique, en particulier l'influence du demi-angle de cône  $\alpha$  et de la pression initiale  $p_0$ , ce que KHASAINOV [141] *et al.* ont simulé. STREHLOW *et SALM* [142] avaient déjà décrit des comportements de transmission selon  $\alpha$  et  $p_0$ . De manière générale, l'influence de la diminution de  $\alpha$  est qualitativement identique à celle de l'augmentation de  $p_0$  et favorise la transmission :

- Cas super-critique sans aucune extinction : la structure cellulaire est présente sur toute la surface du front dès sa diffraction. Au moment de la diffraction, les tailles de cellules augmentent un peu en périphérie de l'onde transmise sous l'effet de la détente latérale résultant de l'augmentation de la section de propagation. Elles retrouvent rapidement leur taille initiale.
- Cas super-critique avec extinction partielle : les cellules disparaissent en périphérie du front. La section centrale du front continue à être cellulaire mais diminue à mesure de l'avancée du front sous l'effet de l'onde de détente à propagation convergente issue de la diffraction. Une détonation se réamorçage transversalement dans l'espace choqué non-brûlé compris entre les gaz brûlés en expansion latérale et le choc inerte qu'ils poussent. Le système relaxe rapidement vers une détonation à propagation globalement longitudinale. La détente convergente n'atteint pas l'axe du système, et la section centrale du front ne disparaît donc pas totalement avant le ré-amorçage.
- Cas critique avec extinction totale : la détente convergente atteint l'axe du système, et la section centrale du front disparaît donc totalement. Néanmoins, une détonation ou plusieurs détonations se réamorcent transversalement dans l'espace choqué non-brûlé compris entre les gaz brûlés et le choc inerte qu'ils poussent. Le système relaxe rapidement vers une détonation à propagation globalement longitudinale.
- Cas sous-critique : la section centrale du front disparaît totalement mais aucun ré-amorçage n'est observé.

Les travaux sur les détonations en cônes ont porté une attention particulière sur les limites du comportement critique [141, 143-146]. Si l'angle de divergence excède une valeur critique  $\alpha_{\text{critique}}$ , la détonation se comporte dans le tronçon de section divergente comme dans un espace non confiné. Dans le cas contraire, une détonation surcomprimée



peut s'amorcer aux parois du tronçon derrière l'onde de Mach formée à la paroi par l'interaction du choc diffracté [141, 143]. La présence d'un cône d'angle  $\alpha \leq 60^\circ$  plutôt que d'une variation discontinue de section (*i.e.*  $\alpha = 90^\circ$ ) diminue la valeur minimum du diamètre de tube nécessaire à la transmission de détonation [144] (ou diamètre critique de transmission). SORIN [145] a montré qu'un obstacle placé en début de tronçon d'aire croissante diminue le diamètre critique de transmission.

Nous nous sommes intéressés au cas super-critique, c'est-à-dire à la propagation continue d'une détonation dans un tube droit vers un tronçon de section croissante suffisamment faiblement pour assurer la continuité de sa structure cellulaire.

Nous avons donc choisi des angles de divergence faibles, inférieurs à  $10^\circ$ , de manière à éviter une extinction locale en périphérie du front transmis. La transmission de la détonation comprend une phase transitoire avant de retrouver un comportement quasi-stationnaire.

### 4.2.3 Effets transitoires et géométrie du confinement

La figure 4.16 compare les enregistrements sur dépôt de carbone obtenus dans les tronçons rond et carré d'aire croissante. Nous analysons ces résultats en fonction de la valeur de l'aire  $A(x)$  rapportée à l'aire initiale  $A_0$  (la section du tube droit).

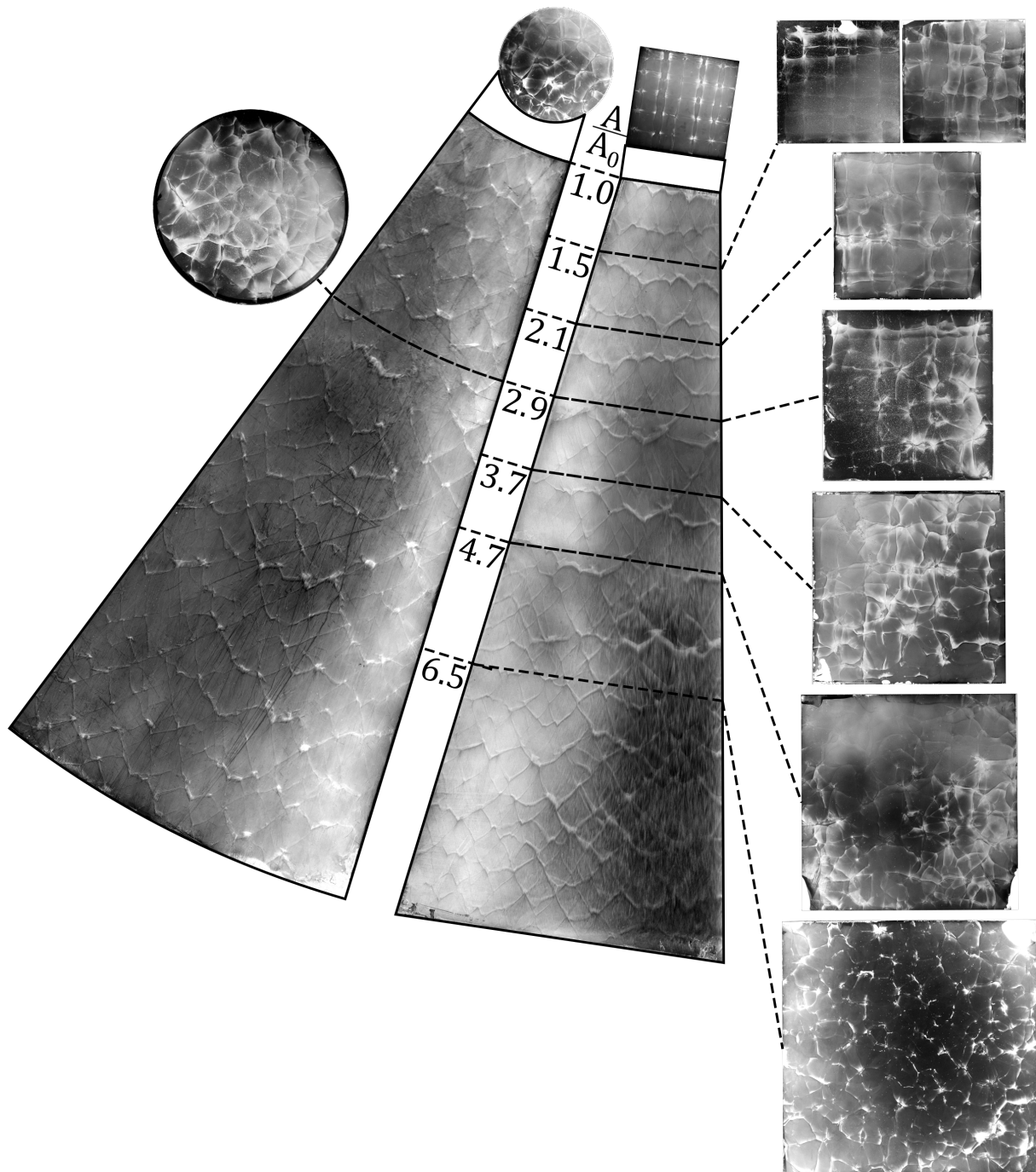


FIGURE 4.16 – Enregistrements longitudinaux et frontaux des structures cellulaires dans les tronçons de section croissante rond (gauche) et carré (droite). Mélange  $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 2\text{Ar}$  à  $p_0 = 20\text{ kPa}$ .

De  $A/A_0 = 1$  à  $A/A_0 = 2$ , dans le tube carré, la régularité frontale se maintient relativement malgré l'augmentation d'aire. La figure 4.17 compare un enregistrement frontal issu du tube droit de  $25 \text{ cm}^2$  avec ceux dans le tronçon divergent à aire équivalente ( $A/A_0 = 1,5$ , *i.e.*  $A = 24 \text{ cm}^2$ ). Il est toujours possible de considérer les ondes transverses dans le tronçon divergent carré comme deux sous-ensembles d'ondes perpendiculaires les unes aux autres et aux parois (*cf.* 4.1.3). L'enregistrement longitudinal de droite en figure 4.16 montre une empreinte d'un de ces sous-ensembles.

De  $A/A_0 = 2$  à  $A/A_0 = 4,7$ , des zones d'irrégularité apparaissent sur les enregistrements frontaux dans le tronçon carré. Dans le tronçon rond, l'irrégularité est semblable à celle à l'origine  $A = A_0$ .

Aux plus grandes sections, *i.e.*  $A/A_0 \geq 4,7$ , les enregistrements frontaux sont semblables quelle que soit la forme de la section. Les enregistrements longitudinaux ne montrent plus les lignes d'impact d'ondes transverses perpendiculaires aux parois. Les traces longitudinales comme frontales des structures sont similaires quelle que soit la forme de la section.

Ces tendances sont donc qualitativement les mêmes qu'en tube de section constante. En particulier, l'irrégularité des facettes sur les vues de face des cellules augmentent avec leur nombre, soit ici avec l'augmentation de l'aire.

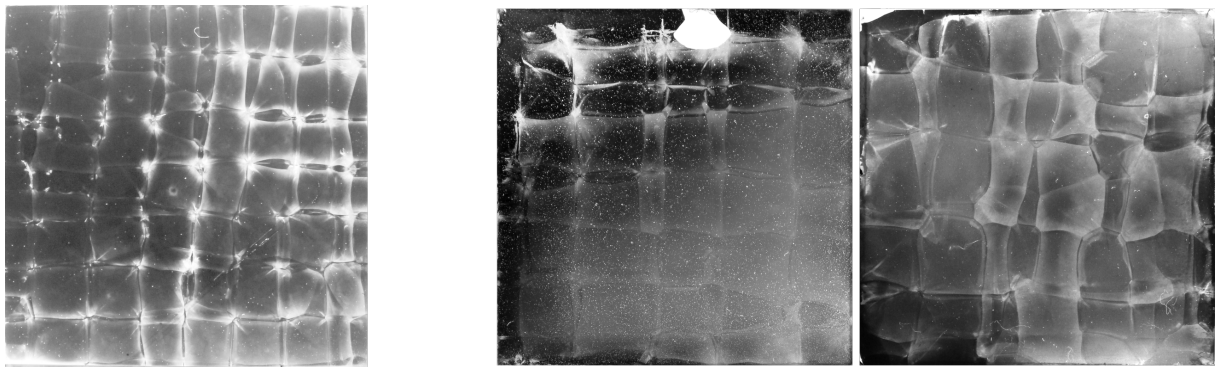


FIGURE 4.17 – Comparaison des enregistrements frontaux d'une détonation  $2 \text{ H}_2 + \text{ O}_2 + 2 \text{ Ar}$  à  $p_0 = 20 \text{ kPa}$  dans un tube de section constante  $25 \text{ cm}^2$  (gauche) et de section croissante à  $24 \text{ cm}^2$  (droite).

La figure 4.18 montre les largeurs  $\lambda$  de cellules mesurées aux parois en fonction de l'aire normalisée  $\bar{A}(x)/A_0$ , où

$$\bar{A}(x) = \frac{1}{\Delta x} \int_x^{x+\Delta x} A(x) dx \quad (4.2)$$

désigne l'aire moyenne sur un intervalle d'abscisse  $\Delta x = 30 \text{ mm}$ . Ce choix permet de diviser le tronçon divergent en portions contenant suffisamment de cellules pour que la

moyenne de leur largeur garde un sens. Les valeurs représentées en noir sont les valeurs moyennes sur la portion  $[A(x); A(x + \Delta x)]$ , les zones bordées par les courbes représentent les écarts-types des largeurs de cellules, qui représentent l'irrégularité longitudinale. Les valeurs en vert représentent les largeurs moyennes et les écarts-types pour les tubes rond et carré droits d'aire constante 71 et 25 cm<sup>2</sup> respectivement.

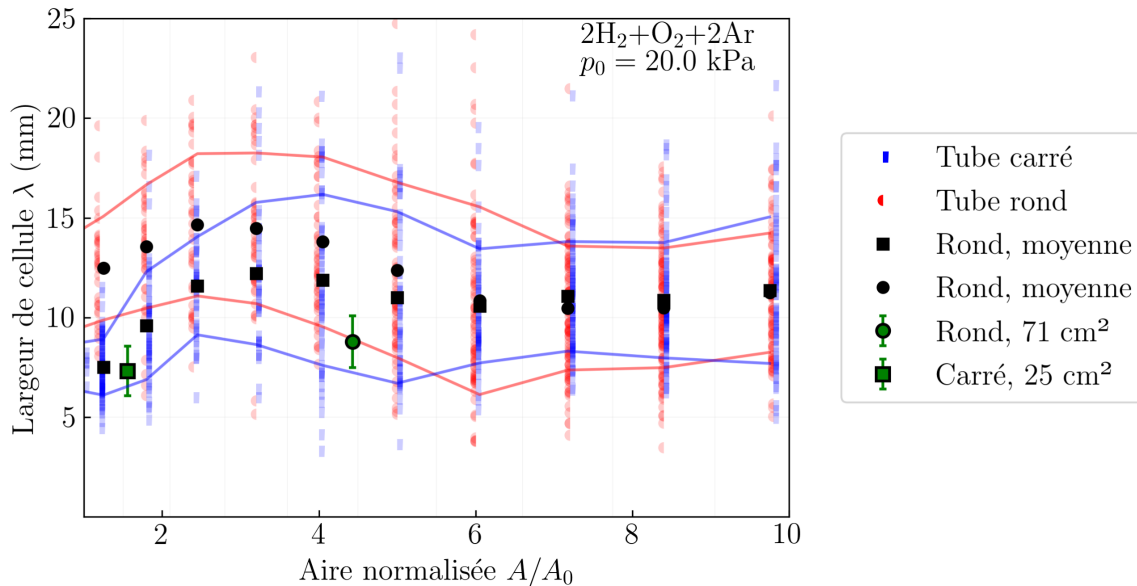


FIGURE 4.18 – Largeur  $\lambda$  des cellules dans les tronçons divergents en fonction de l'aire adimensionnée de la section  $A/A_0$ . Les courbes délimitent les zones contenant 68,2% des mesures. Les symboles verts représentent les valeurs moyennes pour les tubes R' (71 cm<sup>2</sup>) et C' (25 cm<sup>2</sup>), de section constante. Les barres d'erreur représentent l'écart-type des largeurs  $\lambda$ . Les symboles noirs représentent la moyenne locale  $\bar{\lambda}_C$  des valeurs  $\lambda$ .

Pour les deux formes de sections divergentes,  $\lambda$  augmente avec l'augmentation de  $A/A_0$  en début du tronçon divergent puis décroît à partir de  $A/A_0 \approx 3$ . La valeur maximale de  $\lambda$  atteinte dans le tube rond est supérieure à celle atteinte dans le tube carré, ce qui reste qualitativement cohérent avec l'observation en tubes droit que les cellules sont plus larges en tube rond qu'en tube carré (sous-section 4.1.1). La décroissance de  $\lambda$  est ainsi plus forte dans le tube rond que dans le tube carré. La largeur  $\lambda$  se stabilise à une même valeur  $\approx 11 \pm 0,5$  mm quelle que soit la forme de section à partir de  $A/A_0 \approx 6$ . Cependant, nous observons que cette valeur indépendante de la géométrie de section est supérieure à la valeur moyenne  $\bar{\lambda}_C = 8,8$  mm obtenue dans le plus grand tube rond (R') de section constante alors même que, pour cette pression initiale, l'effet de géométrie est négligeable dans ce tube (section 4.1.1). Il est difficile de savoir si cette différence résulte d'un effet persistant mais indétectable (sous-section 4.2.4) de l'expansion instationnaire de l'écoulement dans le tronçon divergent ou d'une influence résiduelle de la section du tube R' sur la propagation quasi-stationnaire. Ainsi, les cellules pourraient être trop larges

dans le premier cas et trop minces dans le second. L'abscisse du maximum de largeur de cellule dans le tronçon divergent augmente avec la diminution de  $p_0$ . GUBIN et KOGARKO [147] avaient également observé une croissance puis une décroissance de la largeur de la cellule pour différents mélanges (hydrogène + méthane + oxygène de différentes richesses  $\phi$  et pressions  $p_0 \in [30; 300]$  kPa) dans un tube de diamètre 32 mm et des demi-angles de 45 et 60°.

Notre interprétation repose sur un effet de l'expansion latérale au moment de la diffraction. Cette expansion ralentit le processus de décomposition chimique. Le refroidissement adiabatique associé augmente les temps et longueurs chimiques caractéristiques et, donc, la largeur des cellules initiales, mais ici sans en changer leur nombre. À mesure de l'avancée de l'onde, l'importance relative de l'expansion latérale diminue, l'onde est moins courbée, le processus de décomposition chimique est plus rapide et, donc, les temps et longueurs chimiques caractéristiques et la largeur des cellules diminuent, et le nombre de cellules augmente.

Lorsque l'aire de la section de tube atteint  $\bar{A}(x)/A_0 \geq 6$ , la largeur de cellule est devenue indépendante de la forme de la section, ce qui est cohérent avec l'observation de l'irrégularité des facettes cellulaire sur la totalité de la surface des fronts, comme le montrent les enregistrements frontaux.

Ainsi, on observe quantitativement les mêmes tendances qu'en tube de section constante, à savoir que les valeurs de largeurs moyennes de cellules convergent quelle que soit la forme de la section avec l'augmentation du nombre de cellules sur le front.

#### 4.2.4 Atteinte du régime quasi-stationnaire

Nous analysons ici comment s'installe le régime quasi-stationnaire après la phase transitoire précédemment décrite.

Pour les faibles divergences retenues, l'expansion latérale de l'écoulement aux premiers instants de la diffraction de la détonation ne peut pas induire d'extinction périphérique du front cellulaire mais seulement une courbure du front. Elle est par exemple observée sur la première partie des dépôts de carbone du tronçon divergent carré par les traces courbées d'impacts des ondes transverses. La figure 4.19 montre ces impacts surlignés en rouge. Puisqu'il n'y a pas d'extinction périphérique, les impacts transverses sont observables sur toute la section du tronçon.

Nous définissons d'abord la rugosité  $\varepsilon$  d'un front cellulaire comme la distance maximale

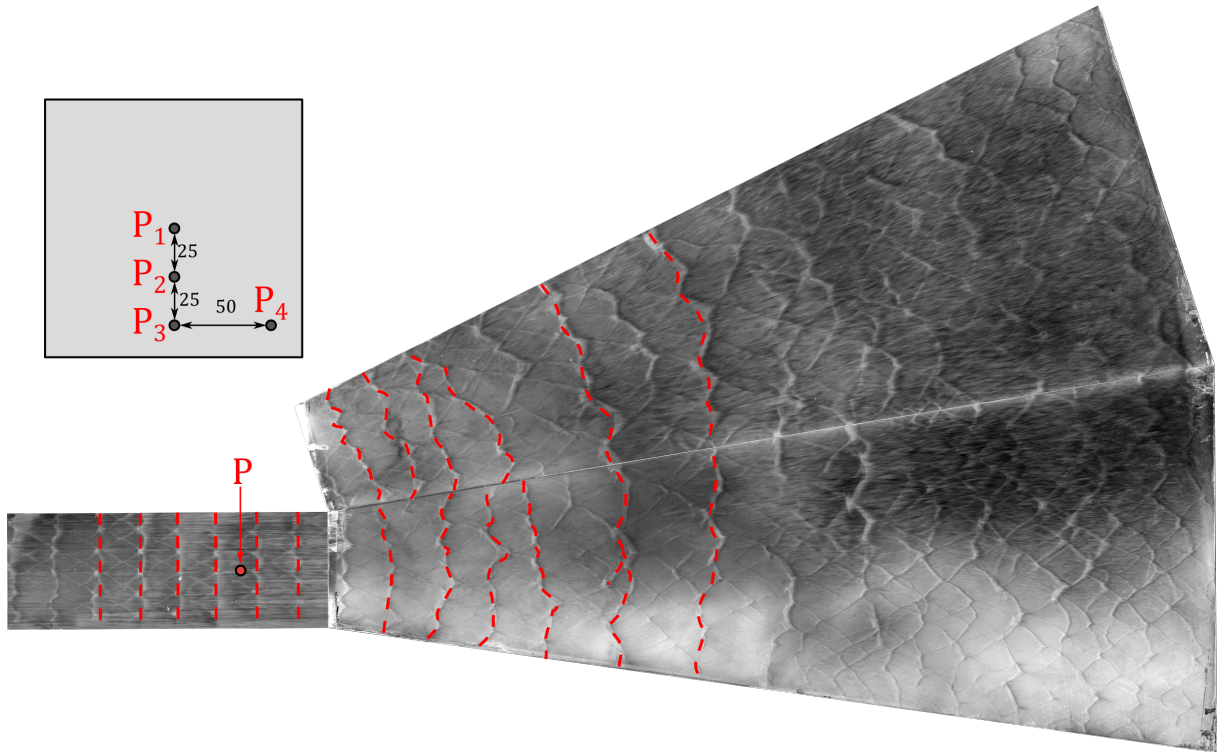


FIGURE 4.19 – Disparition progressive des impacts (en rouge) des ondes transverses normales à la paroi dans le tronçon divergent carré.

entre deux points de ce front projetée selon la direction de propagation. Elle vaut  $\varepsilon \approx 3.5$  mm à  $p_0 = 20$  kPa dans un tube droit et le rayon de courbure associé est  $\approx 40,3$  mm, comme le montrent les images d'ombroscopie (sous-section 3.3.2). Pour une vitesse moyenne dans le tube carré de  $\approx 2790$  m/s (figure 4.10), l'écart maximum entre temps d'arrivée de deux points du front est donc  $\delta t_{plan} \approx 1,2 \mu\text{s}$ .

Nous étudions ensuite la forme globale des fronts cellulaires dans les tronçons divergents par l'analyse des temps d'arrivée des fronts de détonation sur les brides de fond des tronçons. Ces temps sont donnés par les instants de déclenchements des capteurs de pression lors de l'impact (section 3.1.2, figures 3.3 et 4.19). La table 4.1 donne les instants de déclenchements des capteurs ( $P_n$ ) référencés à celui du capteur ( $P_1$ ). La table 4.2 donne les vitesses moyennes de propagation en tronçon divergent calculées à partir des intervalles de déclenchement des capteurs ( $P_1$ ) et ( $P$ ) (figures 3.2 et 3.3).

En approximant le front de détonation dans les sections d'aire croissante par une surface à courbure faiblement variable dans le temps, le rayon de courbure du front dans le tube divergent carré est  $R_{CC} \approx 300$  mm au moment de l'impact en fin de tronçon. Dans le tronçon divergent de section ronde, les rayons de courbure  $R_{CRn}$  sont données par les déclenchements des capteurs  $P_n$  au cours de l'avancée du front, soit  $R_{CR2} \approx 500$  et  $R_{CR3} \approx 430$  mm.

Nous observons ainsi que ces valeurs sont beaucoup plus grandes que le rayon de courbure d'une cellule défini par la rugosité du front en tube droit. Les variations de vitesses mesurées dans chacun des tronçons (table 4.2) sont de l'ordre de la centaine de m/s, donc dans les incertitudes de mesures.

Nous concluons donc que, selon les moyens de notre analyse, les effets d'expansion latérale, *e.g.* la courbure du front, semblent devenir négligeables vers la fin du tronçon. La détonation y a une forme apparemment plane à comportement quasi-stationnaire de mêmes propriétés qu'en tubes droits de mêmes sections.

TABLE 4.1 – Temps de déclenchement en  $\mu\text{s}$  des capteurs piézoélectriques ( $P_n$ ) référencés à celui du capteur ( $P_1$ ) (figure 3.2) en fonction de leurs positions relatives à l'axe du tronçon

Capteur	Section carrée		Section ronde	
	Distance (mm)	Temps ( $\mu\text{s}$ )	Distance (mm)	Temps ( $\mu\text{s}$ )
$P_2$	25,0	0,56	32,5	0,56
$P_3$	50,0	2,22	65,0	2,62
$P_4$	70,7	4,08	-	-

TABLE 4.2 – Vitesses moyennes de propagation dans les tubes droits et divergents. L'incertitude est de 115 m/s [132]

Vitesse (m/s)	Section carrée	Section ronde
Tube droit	1966	1874
Tronçon divergent	1861	1872

## 4.3 Diffraction et ré-amorçage de la détonation à travers un orifice

Nous avons montré (section 4.1) que la géométrie de la section de tube a une influence sur la propagation simple de la détonation dans un tube droit. Elle se manifeste par une différence de largeur de cellule moyenne  $\bar{\lambda}_C$  pour des conditions initiales identiques ( $p_0, T_0$ , richesse) du pré-mélange réactif si l'aire de la section ou la pression initiale  $p_0$  sont trop petites. Inversement, si ces paramètres sont suffisamment grands, la géométrie n'a plus d'influence sur  $\bar{\lambda}_C$ , et les cellules de détonation montrent des vues de face irrégulières. La largeur de cellule définie en tube droit et large est utilisée, notamment, pour prédire le comportement de la détonation lors de phénomènes transitoires tels que sa diffraction à travers une plaque perforée [77, 148]. Dans cette section, nous étudions comment une détonation stationnaire se comporte après une telle diffraction selon la forme de la section d'un tube droit (section 3.3.2).

Les phénomènes de ré-amorçage de la détonation dans un tube résultent généralement de l'existence de "points chauds". Ces hétérogénéités peuvent avoir plusieurs origines, éventuellement combinées, comme des défauts de paroi, des couches limites turbulentes ou des états initiaux non uniformes. Dans leur revue, CICCARELLI et DOROFEEV [122] rappellent les travaux sur l'initiation d'une détonation par "point chaud", c'est-à-dire dans des domaines à forts gradients de temps d'induction, de pression et de température, d'où naît une flamme auto-accélérée. Les ondes de compression en amont du front de flamme s'amplifient jusqu'à la formation d'un choc qui, s'il est suffisamment soutenu par la flamme en accélération, peut devenir suffisamment puissant pour amorcer une explosion entre le mélange entre le choc et la flamme. La détonation se développe alors si les conditions du couplage choc-combustion se maintiennent. Ce mécanisme canonique est aujourd'hui désigné par l'acronyme SWACER pour *Shock Wave Amplification by Coherent Energy Release* [149], [150]. Les conditions se cumulent dans les couches limites en parois du tube et, dans un tube à section carrée, à la jonction de parois adjacentes. Il existe de nombreuses observations de ré-amorçage de la détonation dans des tubes tels que la TDD, en fonction de la section du tube, et la diffraction lors d'interactions avec des obstacles de formes, d'espacements, de rapports d'ouverture, de nombre de trous, de taille, *etc.* [148]

À notre connaissance, il n'y a pas eu d'étude sur la dépendance de la diffraction à la forme de la section du tube. Nous décrivons ici nos observations en tubes de section carrée et ronde de même aire  $16 \text{ cm}^2$ .



### 4.3.1 Paramètres d'étude

Nous avons identifié six scénarios de diffraction. Quatre sont critiques, un est super-critique et un est sous-critique. Pour chaque mélange, ces scénarios sont déterminés par le rapport d'ouverture RO et la pression initiale  $p_0$ . La figure 4.20 montre les obstacles utilisés. La pression initiale est modifiée pour obtenir l'un ou l'autre scénario selon RO et la forme ronde ou carrée de la section.

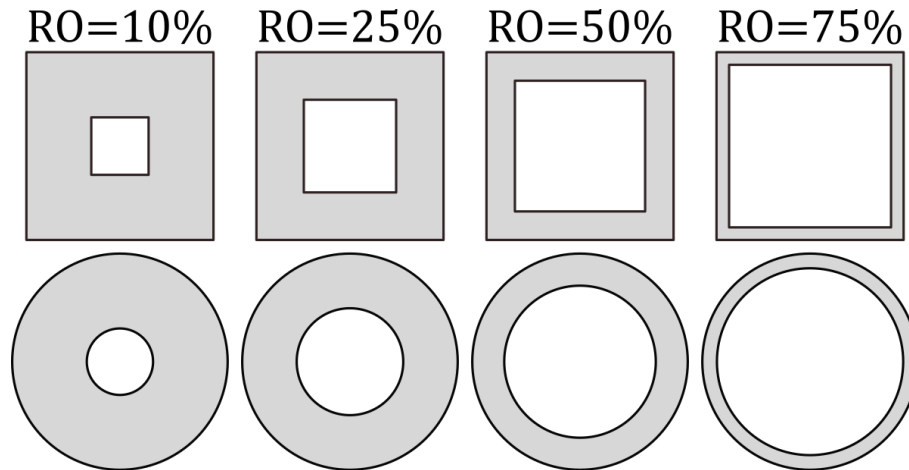


FIGURE 4.20 – Schéma des obstacles utilisés pour l'étude.

Ces scénarios ont ici en commun que le choc créé lors de la diffraction par l'obstacle interagit symétriquement avec la ou les paroi(s) du tube. L'analyse des enregistrements montre que cette interaction génère presque instantanément quatre ondes de Mach dans le tube carré et une onde de Mach toroïdale dans le tube rond. Chaque onde se propage alors le long de la (des) paroi(s) tandis que son front converge vers l'axe des tubes. Les scénarios diffèrent selon que l'onde de Mach participe ou non au ré-amorçage de la détonation et, le cas échéant, selon la manière dont elle y participe. Ces scénarios sont :

- Pas de réamorçage de la détonation en aval de l'obstacle. Nous l'avons observé pour les faibles RO ou  $p_0$ .
- Réamorçage de la détonation par convergence de chocs en centre de tube. Nous l'avons observé en tube carré pour RO=50%.
- Réamorçage de la détonation par convergence de chocs dans les coins de section. Nous l'avons observé en tube carré.
- Réamorçage de la détonation par Transition Déflagration-Détonation. Nous l'avons observé pour  $RO \leq 25\%$  en tube rond et RO= 10% en tube carré.
- Réamorçage de la détonation par réflexion du choc sur la paroi. Nous l'avons observé pour les grandes pressions initiales ou RO intermédiaires.

- Transmission de la détonation sans extinction de celle-ci. Nous l'avons observé pour  $RO \geq 50\%$  pour le tube rond et  $RO=75\%$  dans le tube carré.

Nous décrivons d'abord les scénarios obtenus en tube carré aux sous-sections 4.3.2 à 4.3.6), puis nous les comparons avec ceux obtenus en tube rond en sous-section 4.3.7.

### 4.3.2 Découplage choc/zone de réaction et échec de ré-amorçage

La figure 4.21 montre une superposition d'images de chimiluminescence colorisées et d'ombroscopie ultra-rapides d'une détonation dans le mélange  $2H_2 + O_2$  à  $p_0 = 60$  kPa après avoir franchi l'obstacle d'ouverture  $RO=10\%$  dans le tube de section carrée. Ces images donnent un aperçu de la dynamique de la diffraction sur l'ensemble de la section transversale dans le tube carré, et les enregistrements sur dépôt de carbone fournissent des informations sur les parois des tubes rond et carré. L'onde de choc diffracte lors de son passage de l'obstacle et perd en force sous l'effet de l'onde d'expansion qui se dirige vers le centre du tube. Cette réduction de force induit une baisse de température en aval du choc, donc une augmentation du temps d'induction [122, 151]. La zone de réaction finit par se découpler du choc [136, 152, 153].

La figure 4.22 montre le cas d'une détonation de  $2H_2 + O_2$  à  $p_0 = 15$  kPa franchissant l'obstacle d'ouverture  $RO=25\%$ . Après diffraction, l'onde de choc atteint les 4 parois du tube les plus proches de l'orifice, *i.e.* les points situés sur les milieux de parois (fig. 4.22, 1-2). Il résulte 4 complexes constitués du choc réfléchi se propageant vers le centre du tube, et d'un choc plus puissant et rapide se propageant le long des parois du tube (fig. 4.22, 3). Les 4 chocs réfléchis interagissent au centre du tube pour former un choc plan et inerte (fig. 4.22, 4-7). Il n'y a pas de ré-amorçage de la détonation en aval de l'obstacle (fig. 4.22, enregistrement sur dépôt de carbone).

### 4.3.3 Ré-amorçage par convergence de chocs

La figure 4.23 montre le cas d'une détonation dans  $2H_2 + O_2 + 2Ar$  à  $p_0 = 12,5$  kPa diffractée à travers l'obstacle d'ouverture  $RO=25\%$ . Les ondes réfléchies sur les parois convergent vers l'axe du tube. Leur convergence produit une onde de Mach suffisamment puissante pour enflammer le pré-mélange et ré-amorcer la détonation (fig. 4.23, 5-6). Cette dernière étant divergente, elle se propage partiellement dans le milieu pré-choqué par les ondes diffractée et réfléchies où se situent des gaz frais et brûlés, et partiellement dans le pré-mélange frais. Cette détonation divergente atteint les parois après son expansion,

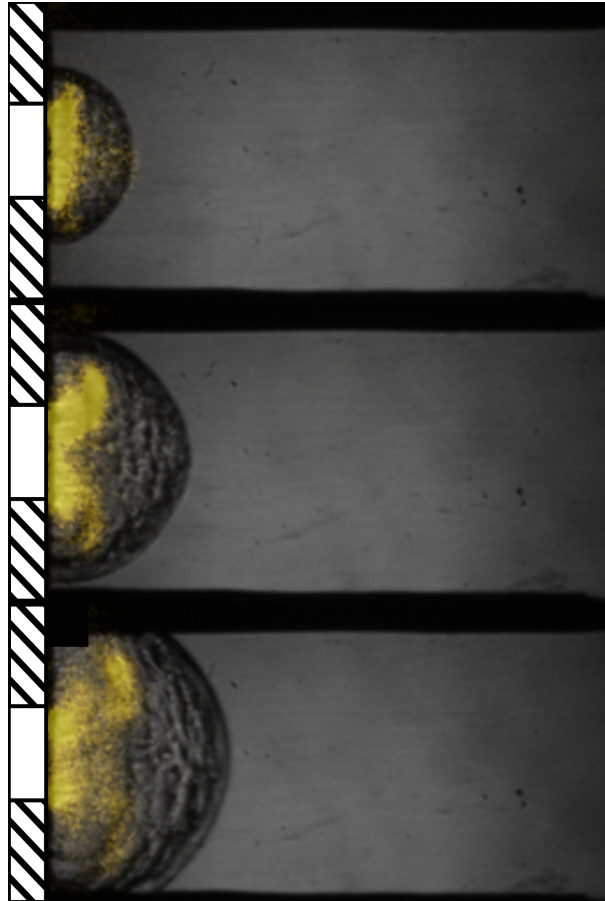


FIGURE 4.21 – Diffraction de l'onde de choc et découplage de l'onde de combustion après passage de l'obstacle d'ouverture  $RO=10\%$  d'une détonation dans  $2H_2 + O_2$  à  $p_0 = 60$  kPa (Superposition d'images de chimiluminescence colorisée et d'ombroscopie,  $f_{\text{caméra}} = 250$  kHz).

et redevient plane. Les enregistrements sur dépôt de carbone (fig. 4.23) montrent que la détonation à l'aval de l'obstacle est plus irrégulière longitudinalement qu'à son amont.

La figure 4.24 montre le cas d'une détonation de  $2H_2 + O_2$  à  $p_0 = 30$  kPa franchissant l'obstacle d'ouverture  $RO=25\%$ . Les chocs se propageant le long des parois après réflexion du choc diffracté interagissent par paires aux quatre coins du tube (fig. 4.24 2). Cette interaction produit quatre domaines de type "point chaud" suffisamment énergétiques pour ré-amorcer une détonation sur-comprimée dans le milieu pré-choqué par les ondes se propageant le long des parois adjacentes (fig. 4.24 3-4). La détonation résultante rattrape les ondes réfléchies en aval de l'obstacle, se propage dans le pré-mélange frais, et se restabilise à sa valeur à celle avant l'obstacle (fig. 4.24 5). Les enregistrements sur dépôt de carbone montrent la symétrie du phénomène sur une des parois de tube. La surcompression de l'onde se manifeste par des cellules plus petites qu'avant l'obstacle.

Ces deux mécanismes de ré-amorçage par interaction choc-choc (en coin et au centre

du tube carré) peuvent être observés sur un même cas, comme sur les figures 4.25, où la détonation amorcée en coin s'éteint avant le ré-amorçage par convergence des chocs sur l'axe du tube.

#### 4.3.4 Ré-amorçage par réflexion de choc sur la paroi

La figure 4.27 montre le cas d'une détonation de  $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 2\text{Ar}$  à  $p_0 = 70$  kPa traversant l'obstacle d'ouverture  $\text{RO} = 25\%$ . Les ondes de choc réfléchies sont suffisamment fortes pour amorcer elles-mêmes une détonation sur-comprimée. Ces détonations se recombinent pour reformer une détonation auto-entretenu, plane, similaire à celle en amont de l'obstacle.

#### 4.3.5 Ré-amorçage par Transition Déflagration-Détonation

Le pré-mélange s'enflamme aux points chauds de la paroi. La flamme s'auto-accélère et finit par former un choc qui amorce une détonation cellulaire. Les instabilités de type Kelvin-Helmoltz (KH) et Rayleigh-Taylor (RT) qui interviennent dans les phénomènes de TDD [122] conduisent à une faible reproductibilité expérimentale.

Dans le tube carré, une TDD peut survenir au centre d'une paroi avant d'être rattrapée par une détonation ré-amorcée dans les coins, *e.g.* figure 4.26.

#### 4.3.6 Transmission de la détonation

La figure 4.28 montre le cas d'une détonation dans  $2\text{H}_2 + \text{O}_2$  à  $p_0 = 50$  kPa traversant l'obstacle d'ouverture  $\text{RO} = 75\%$ . La surface bloquée par l'obstacle est donc faible devant la surface totale de la section du tube. Le découplage entre les ondes de choc de combustion n'est pas suffisamment avancé quand l'onde de choc diffractée est réfléchi sur les parois de tubes. Les cellules en aval de l'obstacle peuvent être plus larges qu'en amont, avant de se restabiliser à leur largeur initiale (*e.g.* figure 4.28).

#### 4.3.7 Comportement selon la forme de la section

La figure 4.30 montre les enregistrements sur plaque de dépôts de carbone des scénarios décrits ci-dessus selon la forme de la section ronde ou carrée des tubes.

De  $p_0 = 7,5$  à  $50$  kPa, la détonation est transmise dans les tubes rond et carré pour l'obstacle  $RO = 75\%$ . L'ensemble des autres cas testés est résumé sur la figure 4.29. Aucun ré-amorçage par interaction choc-choc ne semble survenir dans le tube rond. Seuls les scénarios d'extinction sans ré-amorçage, de TDD, de ré-amorçage par interaction choc-paroi et de transmission  $\gamma$  sont observés, ce que rapportent CICCARELLI et BOCCIO [151]. Cela s'explique par la concentricité du tube et du choc diffracté. La réflexion de ce dernier se fait sur une ligne *i.e.* le périmètre de la section, et non en un ou plusieurs points. Cela crée systématiquement une onde de choc réfléchie toroïdale plus puissante que dans le tube carré. D'autre part, l'absence de coins dans le tube rond limite la turbulence et les points chauds par frottement contre les parois.

Un scénario différent est observable dans les tubes carré et rond, toutes choses égales par ailleurs, *i.e.*, à  $RO$ , mélange et  $p_0$  identiques, pour les obstacles de rapport d'ouverture  $RO = 10, 25$  et  $50\%$ . Une interprétation possible est, d'après la section 4.1, la différence de largeur de cellule  $\bar{\lambda}_C$  d'un tube à l'autre sur la plage de pression  $p_0 \leq 30$  kPa. Cependant, pour  $RO = 10\%$ , le scénario observé peut être également différent d'un tube à l'autre, malgré l'influence négligeable de la forme du tube sur la propagation simple de la détonation. Ainsi, pour  $2H_2 + O_2 + 2Ar$  à  $p_0 = 80$  kPa, le ré-amorçage se fait par TDD dans le tube rond et par interaction choc-choc dans le tube carré.

De plus, la figure 4.29 montre le scénario observé en fonction du tube, du mélange, de  $RO$  et de la largeur de cellule en amont de l'obstacle  $\bar{\lambda}_C$  ou du rapport entre le diamètre hydraulique  $\varnothing_{ouverture}/\bar{\lambda}_C$  et  $a_{ouverture}/\bar{\lambda}_C$  pour les tubes rond et carré.

Pour une taille de cellule équivalente, et un obstacle  $RO = 25\%$  pour le mélange  $2H_2 + O_2$ ,  $RO = 10\%$  pour le mélange  $2H_2 + O_2 + 2Ar$ , les conditions d'extinction sans ré-amorçage sont les mêmes mais, pour les autres couples mélange- $RO$ , ces conditions sont différentes. Globalement, la gamme des largeurs de cellule pour un ré-amorçage en tube carré est plus étendue que celle en tube rond.

Si le volume en aval de l'obstacle n'est pas confiné, alors il est établi que pour  $T_0 = 293$  K, la transmission ou le ré-amorçage de la détonation se fait si  $d_{hydraulique} > 10 - 13\bar{\lambda}_C$  [151]. Dans nos conditions, nous n'avons pas dégagé de critère pouvant lier la taille de l'ouverture à la largeur de la cellule  $d_{hydraulique}/\bar{\lambda}_C$  garantissant un ré-amorçage. En particulier, pour le mélange  $2H_2 + O_2 + 2Ar$  et  $RO = 10\%$ , le critère de criticité  $d/\bar{\lambda}_C > 1$  proposé par PERALDI et *al.* [154] n'est pas satisfait. En effet, leur critère a été établi pour des conditions de transmission d'un tube à un grand volume alors que nous avons la même section avant et après l'obstacle.

En conclusion, la forme de la section a une influence directe sur la dynamique de la diffraction de la détonation par un obstacle. Les limites de ré-amorçage sont plus larges en tube carré qu'en tube rond mais, surtout, cette influence ne se traduit pas par une modification transitoire de la propagation simple de la détonation. En effet, elle est observée au delà de l'intervalle de pression initiale  $p_0$  où, en situation de propagation simple, la forme de la section du tube n'a plus d'influence sur la largeur moyenne  $\bar{\lambda}_C$  des cellules.

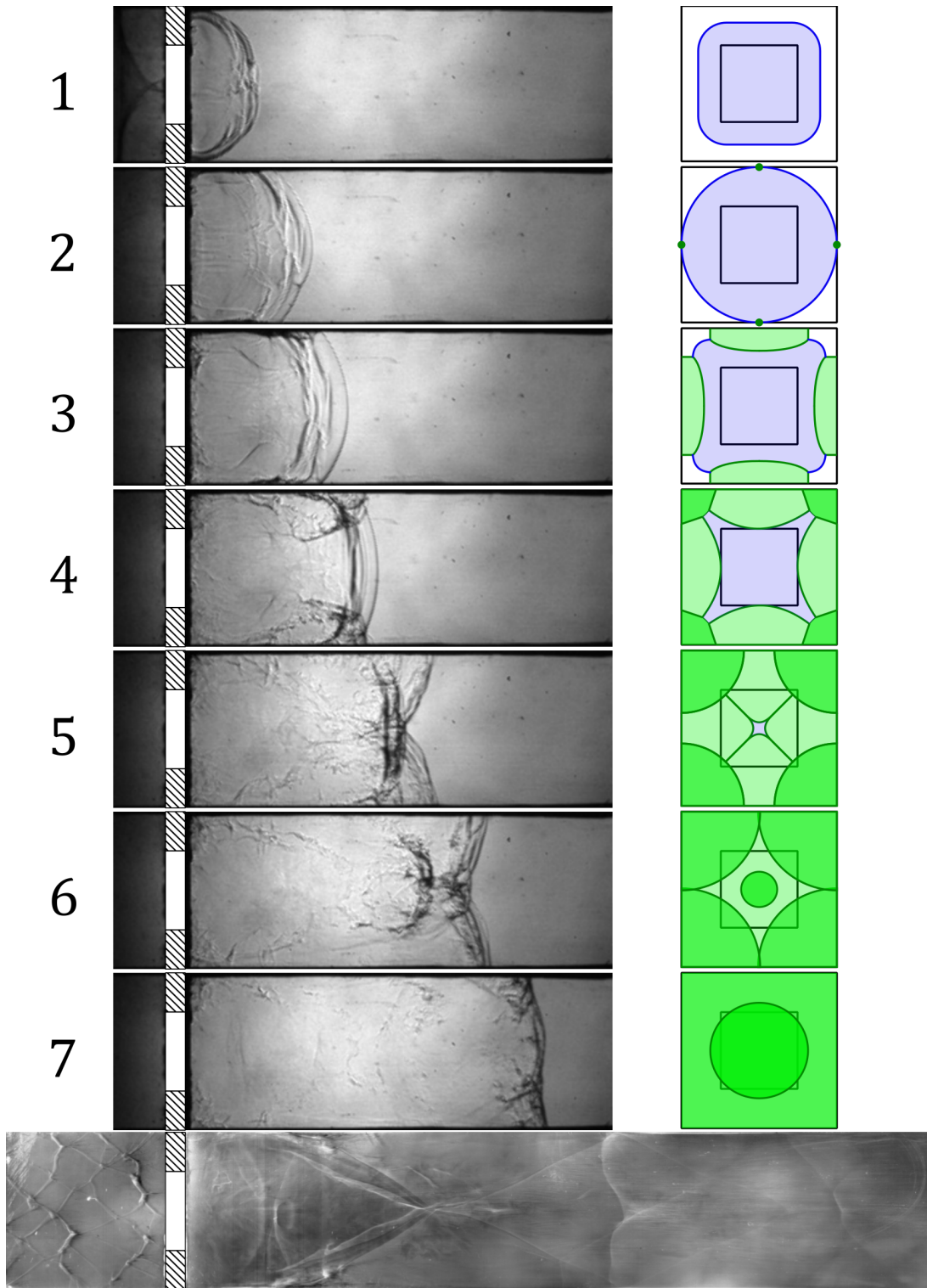


FIGURE 4.22 – Comportement après passage à travers l'obstacle d'ouverture  $RO=25\%$  d'une détonation dans  $2H_2 + O_2$  à  $p_0 = 15$  kPa. Images 1 à 7 : ombroscopie, image du bas : enregistrement sur dépôt de carbone.  $\Delta t_{\text{images}} = 6,5 \mu\text{s}$ . Section du tube :  $40 \times 40$  mm<sup>2</sup>.

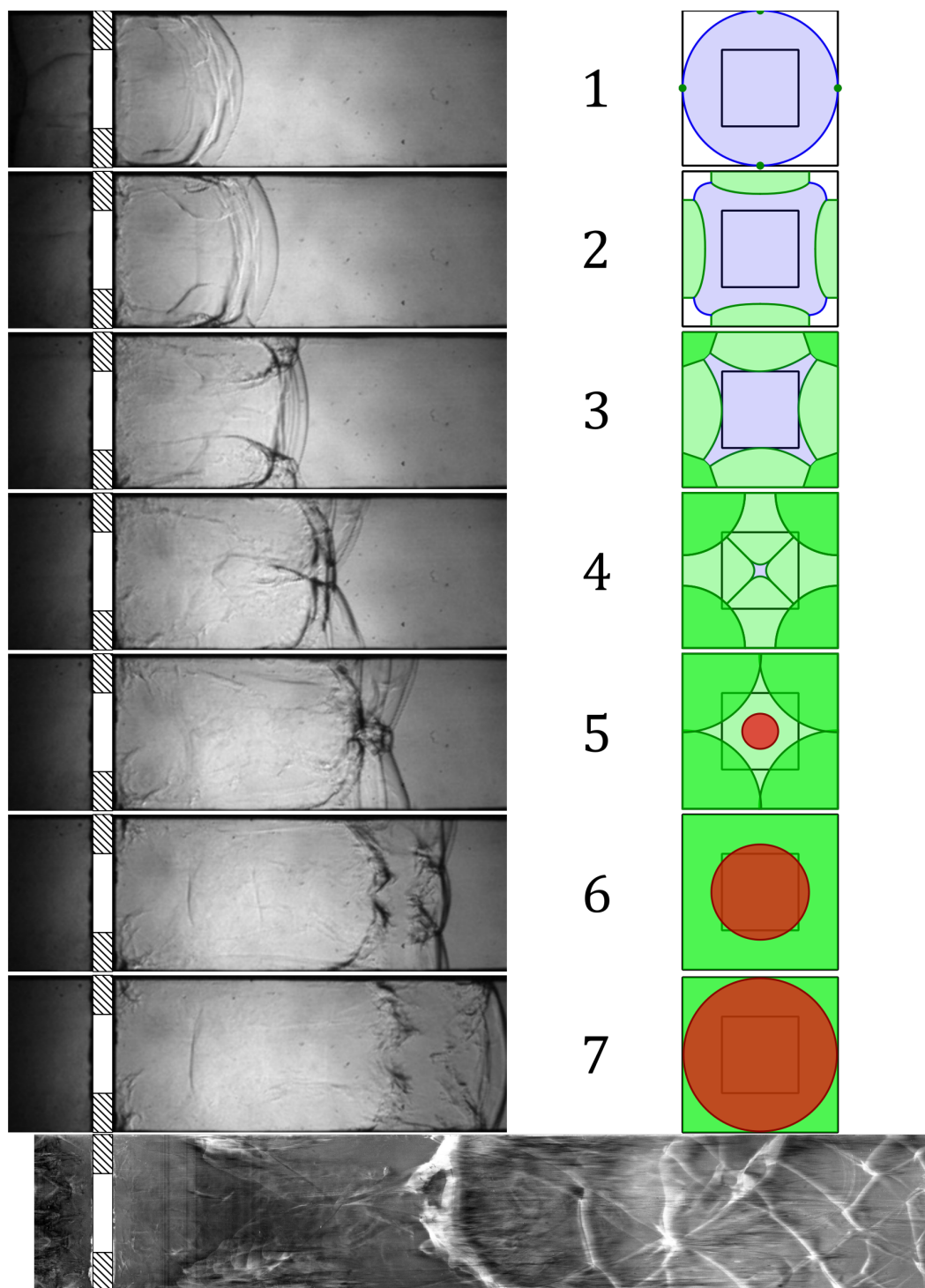


FIGURE 4.23 – Comportement après passage à travers l'obstacle d'ouverture  $RO=25\%$  d'une détonation de  $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 2\text{Ar}$  à  $p_0 = 12,5\text{ kPa}$  (ombroscopie).  $\Delta t_{\text{images}} = 8,5\ \mu\text{s}$ . Section du tube :  $40 \times 40\text{ mm}^2$



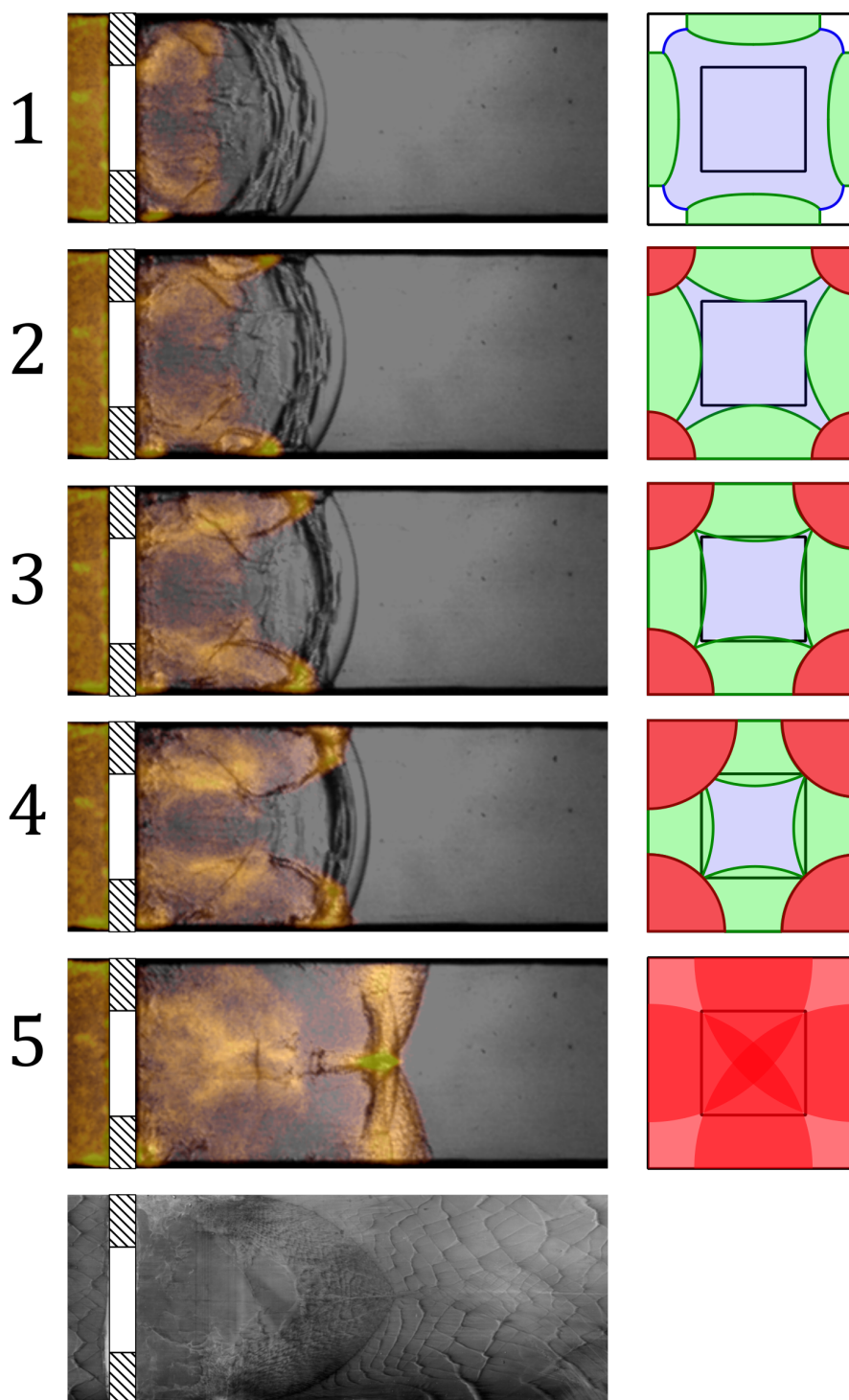


FIGURE 4.24 – Comportement après passage à travers l’obstacle d’ouverture  $RO=25\%$  d’une détonation de  $2\text{H}_2 + \text{O}_2$  à  $p_0 = 30\text{ kPa}$ . Superposition d’images de chimiluminescence colorisée et d’ombroscopie (1 à 5) et enregistrement sur dépôt de carbone (bas).  $\Delta t_{\text{images}} = 3\ \mu\text{s}$ . Section du tube :  $40 \times 40\text{ mm}^2$

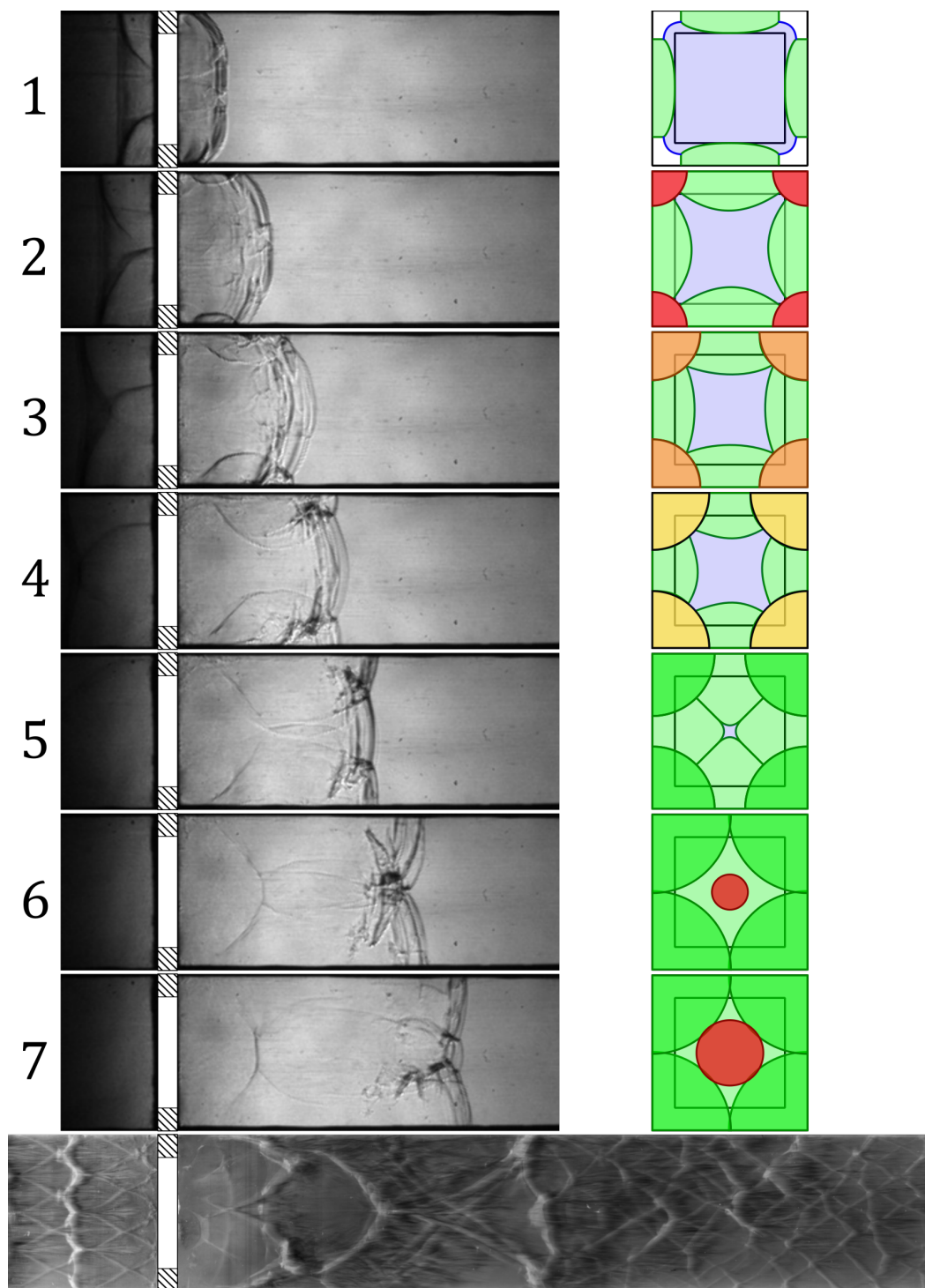


FIGURE 4.25 – Comportement après passage à travers l’obstacle d’ouverture  $RO=50\%$  d’une détonation de  $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 2\text{Ar}$  à  $p_0 = 15\text{ kPa}$ . Ombroscopie (1 à 7) et enregistrement sur dépôt de carbone (bas).  $\Delta t_{\text{images}} = 6,0\ \mu\text{s}$ . Section du tube :  $40 \times 40\text{ mm}^2$

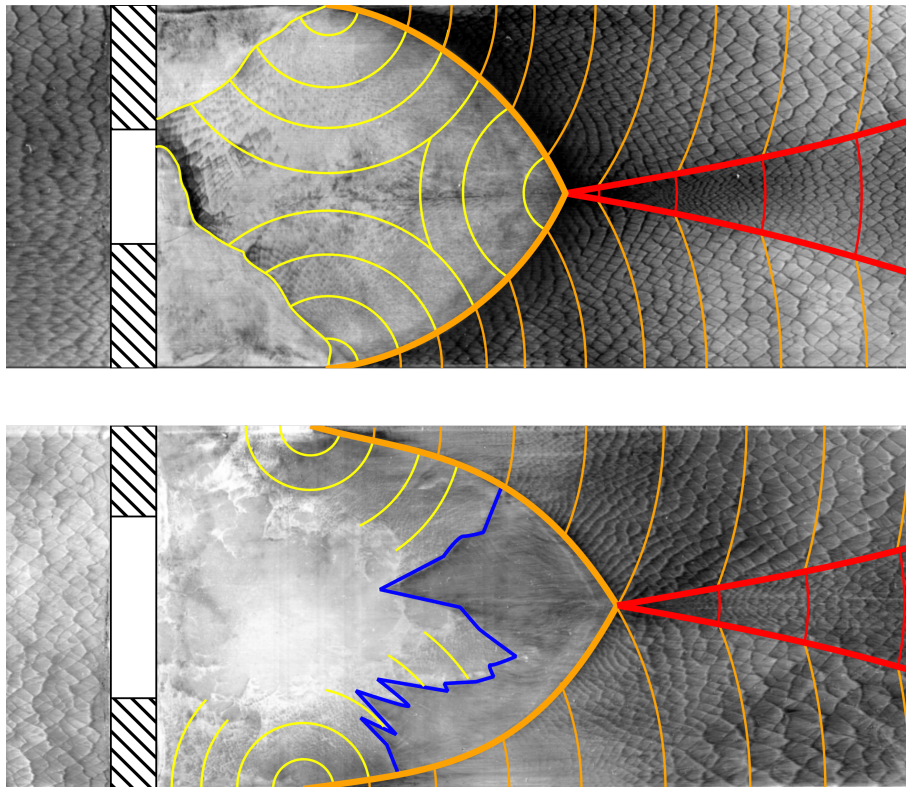


FIGURE 4.26 – Enregistrements sur dépôt de carbone de ré-amorçages par interaction de chocs dans les coins du tube carré. Haut :  $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 2\text{Ar}$ ,  $p_0 = 80\text{ kPa}$ ,  $\text{RO} = 10\%$ , pas de déflagration. Bas :  $2\text{H}_2 + \text{O}_2$ ,  $p_0 = 70\text{ kPa}$ ,  $\text{RO} = 25\%$ , déflagration en centre de paroi. Jaune : détonation très surcomprimée, cellules à peine visibles. Orange : détonation surcomprimée, cellules grandissantes. Rouge : détonation surcomprimée. Bleu : déflagration.

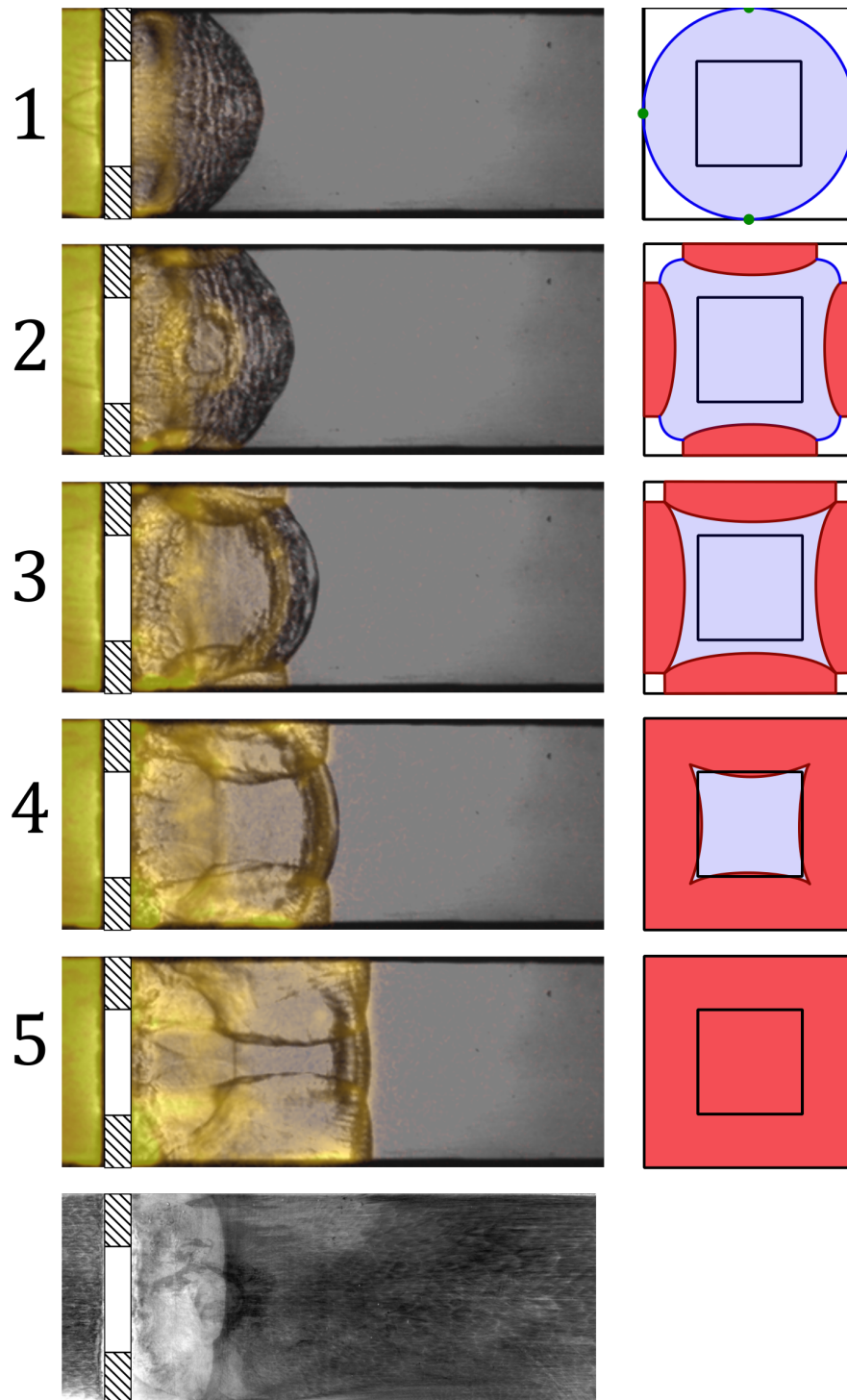


FIGURE 4.27 – Comportement après passage à travers l’obstacle d’ouverture  $RO=25\%$  d’une détonation de  $2H_2 + O_2 + 2Ar$  à  $p_0 = 70$  kPa. Superposition d’images de chimiluminescence colorisée et d’ombroscopie (1 à 5) et enregistrement sur dépôt de carbone (bas).  $\Delta t_{\text{images}} = 4 \mu s$ . Section du tube :  $40 \times 40$  mm<sup>2</sup>

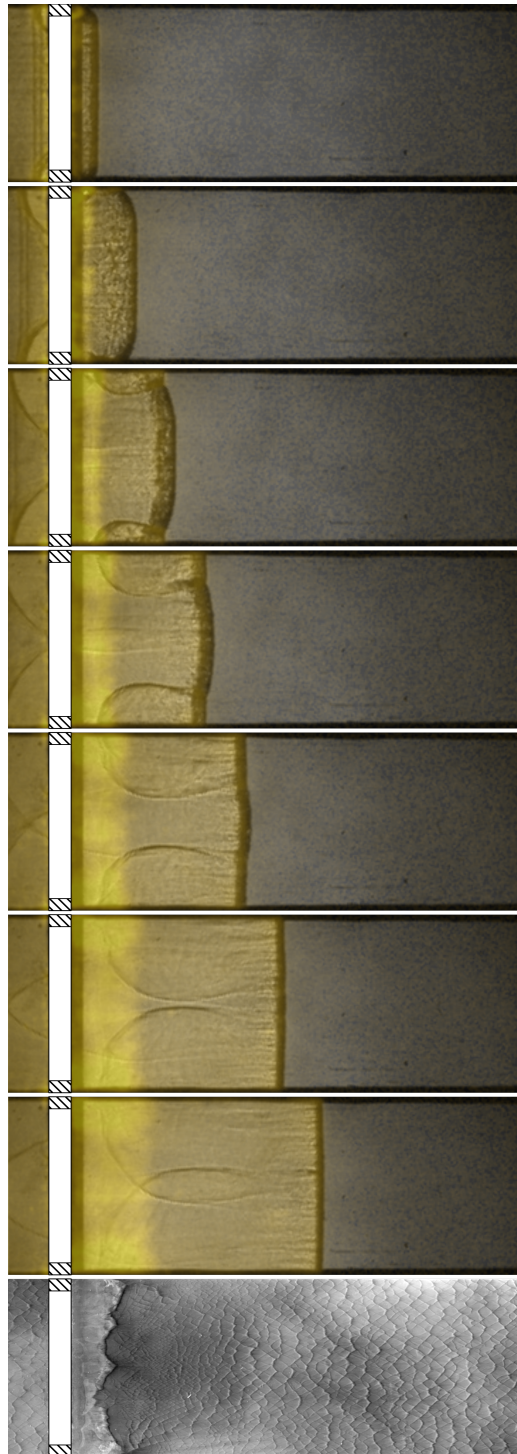


FIGURE 4.28 – Superposition d’images de chimiluminescence colorisée et d’ombroscopie et enregistrement sur dépôt de carbone d’une détonation de  $2\text{H}_2 + \text{O}_2$  à  $p_0 = 50\text{ kPa}$  après diffraction à travers l’orifice d’ouverture  $\text{RO} = 75\%$ .  $\Delta t_{\text{images}} = 3\ \mu\text{s}$ . Section du tube :  $40 \times 40\text{ mm}^2$

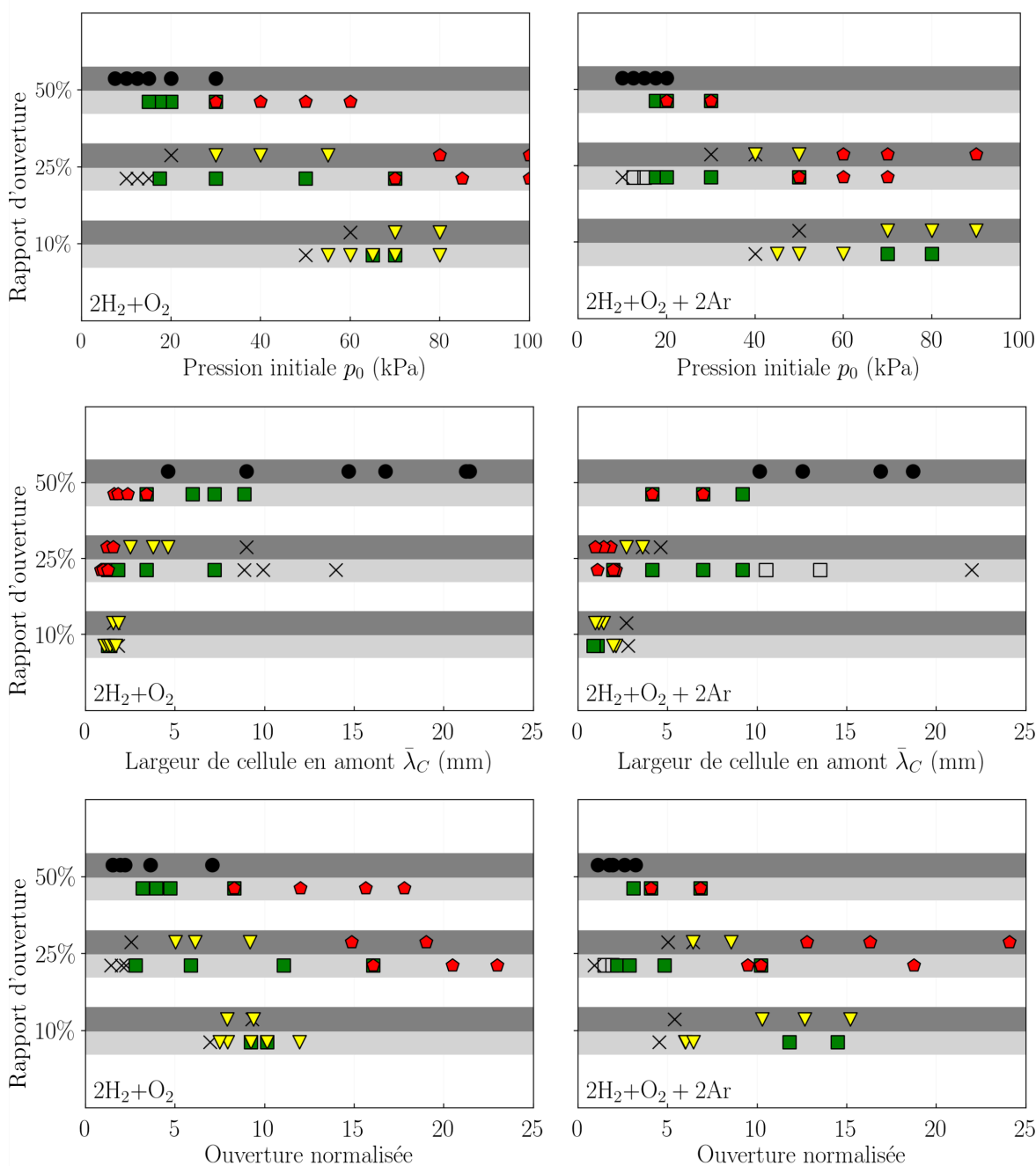


FIGURE 4.29 – Scénarios en fonction du rapport d’ouverture RO et de la section de tube (ronde : gris foncé, carrée : gris clair).

( $\times$ ) pas de ré-amorçage, ( $\square$ ) ré-amorçage choc-choc au centre du tube, ( $\blacksquare$ ) ré-amorçage choc-choc en coin de tube, ( $\blacklozenge$ ) ré-amorçage choc-paroi, ( $\blacktriangledown$ ) ré-amorçage par TDD, ( $\bullet$ ) transmission.

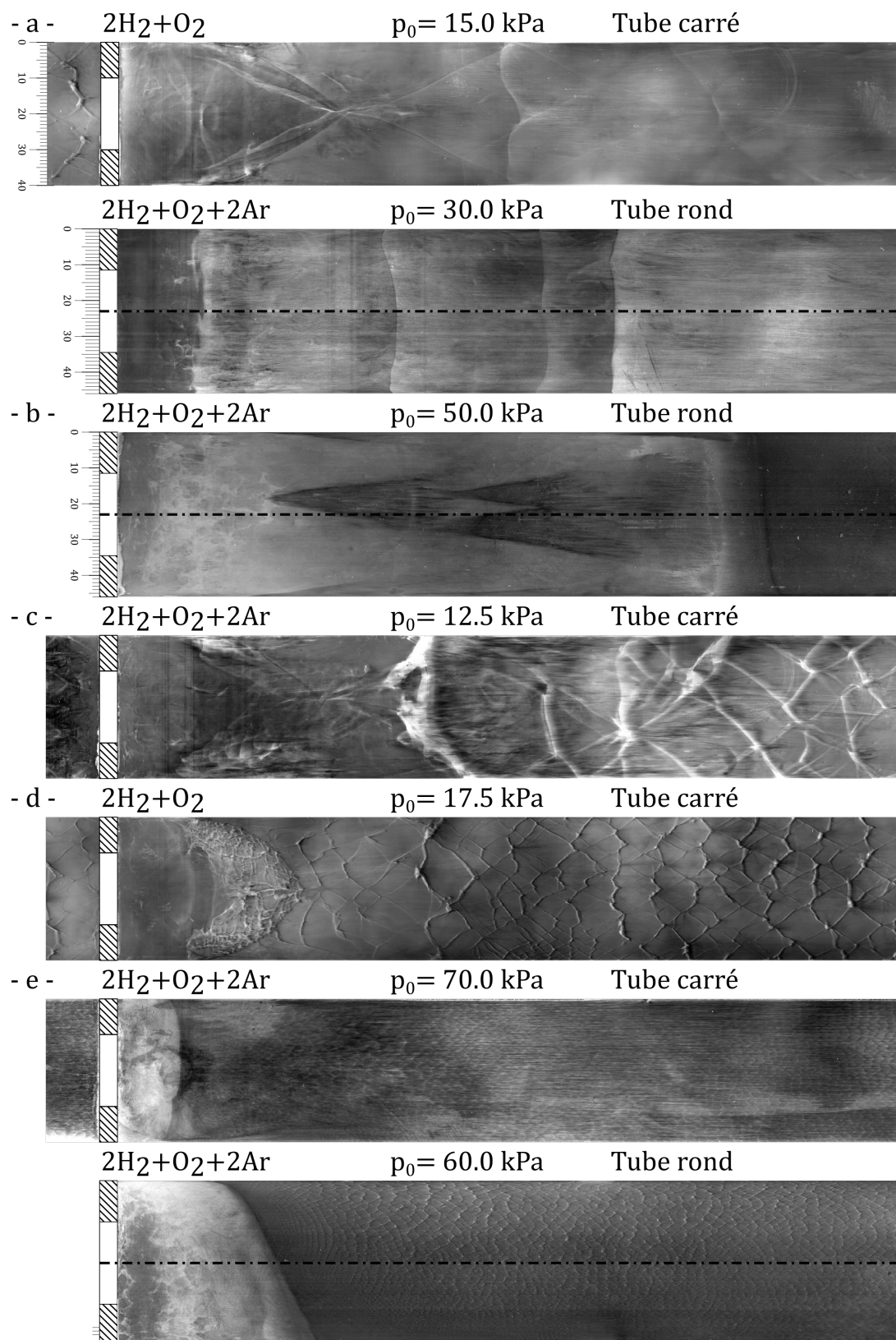


FIGURE 4.30 – Enregistrements sur dépôt de carbone des différents scénarios observés dans les tubes rond et carré avec un obstacle d'ouverture  $RO= 25\%$ . (a) pas de ré-amorçage, (b) ré-amorçage en TDD, (c) ré-amorçage par interaction de chocs en centre de tube, (d) ré-amorçage par interaction de chocs en coin, (e) ré-amorçage par interaction choc-paroi.

## 4.4 Conclusion sur l'influence de la géométrie du confinement

Nous avons présenté des éléments d'appréciation de l'influence de la géométrie du confinement sur les détonations cellulaires se propageant dans les mélanges  $2\text{H}_2 + \text{O}_2 (+ 2\text{Ar})$  avec des pressions initiales  $p_0$  comprises entre 15 et 100 kPa et une température initiale  $T_0 = 293\text{ K}$ .

Les expériences en tubes de sections de forme ronde, carrée ou triangulaire, et d'aire constante (16, 25 et 70,8 cm<sup>2</sup>) montrent que l'influence de la forme des sections est plus faible si le nombre de cellules sur le front est grand, c'est-à-dire quand la dimension transverse du tube est grande devant la largeur de la cellule. L'influence se manifeste par une divergence des largeurs de cellules  $\bar{\lambda}_C$  d'un tube à l'autre, toutes choses égales par ailleurs. Leurs différences relatives diminuent avec l'augmentation de  $p_0$ .

Les enregistrements longitudinaux montrent les losanges irréguliers ou réguliers bien connus pour ces mélanges pour toutes les formes de section et  $p_0$ , mais les enregistrements frontaux montrent des motifs irréguliers pour chacun, sauf pour le mélange  $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 2\text{Ar}$  en tube de section carrée et  $p_0$  suffisamment basse. Tous les motifs frontaux de cellules deviennent irréguliers et indépendants de la forme des sections transversales avec l'augmentation de  $p_0$  ou de  $A$ . La dynamique cellulaire, telle qu'enregistrée pariétalement, n'est donc pas représentative de celle de l'ensemble du front de détonation.

L'influence de la section dépend ainsi du couple  $(p_0, A)$ . Pour l'un des paramètres donné, l'autre doit être suffisamment élevé pour que la géométrie du confinement n'ait plus d'influence. Par exemple, si l'aire  $A$  du tube augmente à  $p_0$  constante, l'influence du tube diminue. En somme, cette influence dépend du nombre de cellules sur le front, et elle disparaît aux grands nombres de cellules.

Nous sommes ainsi emmenés vers la notion de structure cellulaire auto-confinée. Elle désigne les situations où la dynamique d'une cellule n'est déterminée que par son interaction avec ses voisines et de manière identique avec la paroi du tube. En d'autres termes, ce sont les situations pour lesquelles le temps caractéristique de renouvellement d'une cellule est très petit devant le temps caractéristique que mettrait une même onde transverse pour parcourir une distance de l'ordre de la dimension transverse du tube. Notre interprétation de l'irrégularité intrinsèque de motifs frontaux suffisamment nombreux considère que le temps caractéristique de battement cellulaire est alors très petit devant le temps de traversée d'une section. Aux grands nombre de cellules, la dynamique forcée que pourrait



imposer aux ondes transverses une section de tube carrée ou rectangulaire n'a pas le temps d'agir, et les fluctuations locales de la dynamique de l'écoulement à l'échelle du temps de battement cellulaire l'emportent. En termes moins choisis, les perturbations locales agissent plus vite que la dynamique globale. Cela donne une explication alternative de la régularité des motifs observés dans le cas opposé des mélanges stables en tube carré aux faibles nombres de cellules, *i.e.* aux basses pressions initiales.

Les phénomènes transitoires tels que la diffraction de la détonation à travers un orifice subissent également une influence. Elle se manifeste par les limites de comportements super-critiques, critiques et sous-critiques. Il est globalement plus facile de ré-amorcer une détonation dans un tube carré que dans un tube rond, toutes choses égales par ailleurs.

Les arguments expliquant l'influence de la géométrie du confinement sur la propagation ne suffisent pas à expliquer cette influence pour nos comportements transitoires. Notre interprétation est que le domaine des paramètres gérant l'influence de la géométrie sur la propagation est inclut dans celui gérant cette influence sur les comportements transitoires. Nous rapprochons le cas transitoire considéré de ceux relatifs à la transmission d'un tube à un grand volume favorisée par la présence d'un obstacle au débouché du tube [145] ou à l'interaction d'une détonation avec des obstacles en paroi, *e.g.*, une spirale de Shchelkin (section 3.4). Ces cas montrent toujours une amélioration de la transmission par surcompression localisée de la détonation auto-entretenu initiale, *e.g.*, des ondes de Mach. Le degré de surcompression induit par les ondes de Mach créées par l'interaction du choc diffracté avec les parois du tube est ici le paramètre supplémentaire gérant l'influence en transitoire.

# Modèle prédictif d'une largeur représentative de cellule

---

## Sommaire

<b>5.1</b>	<b>Approches antérieures</b> . . . . .	<b>86</b>
<b>5.2</b>	<b>Équivalence des processus cellulaires et ZND</b> . . . . .	<b>90</b>
<b>5.3</b>	<b>Description statistique des cellules de détonation</b> . . . . .	<b>95</b>
5.3.1	Ergodicité et cellules de détonation . . . . .	95
5.3.2	Théorie des graphes et pavage cellulaire . . . . .	95
5.3.3	Probabilités géométriques et processus cellulaire . . . . .	97
<b>5.4</b>	<b>Largeurs de cellules calculées et mesurées</b> . . . . .	<b>101</b>
<b>5.5</b>	<b>Discussion du modèle</b> . . . . .	<b>109</b>

---

Ce chapitre présente un modèle permettant de prédire une largeur représentative pour les cellules tridimensionnelles observées sur les fronts de détonation dans les gaz réactifs. La section 5.1 présente les approches existantes visant à déterminer une telle largeur. La section 5.2 expose son principe physique, à savoir que la dynamique des cellules irrégulières produit la même masse brûlée par unité de temps que le processus ZND plan stationnaire monodimensionnel. La section 5.3 donne d'abord les éléments justifiant que les ondes transverses délimitant les motifs cellulaires irréguliers forment un ensemble à répartition stochastique mais soumis à un processus ergodique stationnaire, soit des motifs dont les distributions statistiques à chaque instant de la propagation du front sont identiques à celles au cours du temps quel que soit l'instant d'échantillonnage. Elle montre ensuite comment la théorie des graphes peut définir une cellule idéale, moyenne, dont l'assemblage à chaque instant est équivalent à celui des motifs irréguliers du front cellulaire 3D réel. Elle propose enfin un calcul de probabilité géométrique pour déterminer la fraction brûlée moyenne qui paramètre le modèle. La section 5.4 compare les largeurs mesurées et calculées pour plusieurs mélanges réactifs, après calcul de la relation temps-position d'un élément fluide dans la zone de réaction ZND nécessaire à la fermeture du problème de compatibilité entre processus cellulaire et ZND. Le modèle peut être facilement mis en œuvre comme un

post-traitement des profils ZND. Il fournit ainsi des estimations instantanées des largeur, longueur et temps de réaction de la cellule, ainsi que des longueurs et temps d'induction et de réaction ZND. Il n'a pas pour but d'expliquer comment les zones de réaction de la détonation deviennent instables, mais plutôt de prédire facilement une largeur moyenne de cellule physique suffisamment précise sans détailler la réalité des interactions complexes de la structure cellulaire.

## 5.1 Approches antérieures

A ce jour, prédire les propriétés géométriques des cellules de détonation reste une difficulté théorique et numérique. VASIL'EV [24] a classé les différentes approches en quatre groupes. Nous en proposons quatre différents pour mieux prendre en compte les approches récentes.

Le premier groupe est celui des simulations numériques à haute résolution. La plupart se fondent sur les équations d'Euler pour les fluides non-visqueux compressibles (section 2.1). Elles utilisent une cinétique chimique détaillée ou simplifiée et sont souvent limitées à deux dimensions d'espace. Ces simplifications sont utiles pour obtenir rapidement des informations qualitatives sur la sensibilité aux paramètres des vitesses de réaction ou de l'équation d'état. Cependant, l'étalonnage des paramètres pour obtenir des informations quantitatives n'est généralement possible que pour une gamme étroite de conditions initiales, ce qui limite leur capacité de prédiction pour les géométries complexes. Par exemple, les cellules numériques en 2D peuvent ne pas avoir la bonne largeur et le bon rapport d'aspect. Dans un objectif de réduction des coûts de conception, restitution et prédiction ne doivent pas être confondues. Néanmoins, l'augmentation de la capacité de calcul conduit à une meilleure représentativité lorsque les trois dimensions d'espace et un mécanisme cinétique détaillé sont pris en compte. Par exemple, CRANE et *al.* [124] ont récemment effectué des simulations en 3D et obtenu des vues frontales qui ressemblent qualitativement bien aux enregistrements expérimentaux, en particulier les nôtres. Cependant, cela nécessite encore de longs temps de calcul à partir de la position de l'allumage pour un grand nombre de cellules par unité de surface de la surface frontale. Ces inconvénients empêchent à ce jour la mise en œuvre d'outils numériques prédictifs, en particulier dans le cas de phénomènes non adiabatiques, tels que les transitions de la déflagration à la détonation, ou les cellules très irrégulières, qui nécessitent la résolution des équations de Navier-Stokes pour un fluide compressible réactif, *e.g.*, [155]. Ces approches sont néanmoins considérées comme une norme en devenir dès que la capacité de calcul le permettra. En effet, elles seules peuvent gérer des équations d'état et des mécanismes cinétiques chimiques réalistes,

tout comme un calcul précis des propriétés CJ nécessite des codes qui prennent en compte la dépendance des propriétés thermochimiques des espèces chimiques à la pression et à la température.

Le deuxième groupe rassemble des travaux théoriques qui utilisent la zone de réaction plane stationnaire du modèle ZND comme la condition initiale à partir de laquelle de petites perturbations linéaires se développent, *e.g.*, [156-158]. Ils visent à sélectionner les modes instables qui devraient évoluer en chocs transversaux représentant le front cellulaire dans les limites des temps longs et des grandes dimensions transversales. Ils combinent la technique des développements asymptotiques et des analyses numériques pour obtenir une équation d'évolution pour la surface du front. Son intégration cherche à obtenir un nombre constant de modes par unité de surface du front, comme dans le cas des détonations multicellulaires. En effet, les cellules expérimentales sont indépendantes des formes et des surfaces de la section transversale dans des tubes de détonation suffisamment longs et larges (section 4.1). Leur avantage est de pouvoir extraire la physique principale par la sélection des paramètres et des grandeurs essentielles. Cependant, ils sont toujours limités à deux dimensions d'espace, et les approximations nécessaires les confinent encore dans une description certes physique mais qualitative. En outre, une estimation mathématique des limites des temps longs et des grandes dimensions transversales est difficile car le nombre de modes augmente avec ces dimensions, et une boîte de calcul trop petite limite le nombre sélectionné, comme pour les détonations marginales.

Le troisième regroupe des études numériques et théoriques visant à modéliser le front cellulaire en imitant le mécanisme réel des interactions des ondes transverses. Les analyses anciennes et récentes comprennent celles de BARTHEL [159, 160], STREHLOW [92, 161], CRANE [162], et CHEEVERS [163]. Les plus récentes modélisent la cellule comme une onde de choc cylindrique dont le noyau d'explosion résulte de la collision des ondes transverses adjacentes convergentes. À une certaine distance du noyau, le temps de réaction devient trop important en raison des effets combinés des expansions transversale et longitudinale. La largeur de la cellule est alors définie comme la corde du choc divergent à cette position. Leur intérêt est de simplifier les recherches du deuxième groupe. Il est difficile d'évaluer les effets cumulés des hypothèses sur la dynamique et la géométrie des chocs, la taille et la distribution des noyaux et les lois de comportement.

Le quatrième groupe rassemble les analyses dimensionnelles fondées sur une relation de proportionnalité entre la largeur moyenne de la cellule  $\bar{\lambda}_C$  et une longueur caractéristique définie à partir des profils ZND de la température  $T$  ou de la thermicité  $\dot{\sigma}$  (Chapitre 2). L'idée originelle semble due à VOLIN et *al.* [164]. Selon les auteurs, la longueur caractéristique est la longueur d'induction  $\bar{\ell}_{ZI}$  ou une longueur de réaction représentative qui

l'ajoute à l'épaisseur de la couche de réaction principale  $\delta\bar{\ell}_{ZR}$ , comme le suggèrent, par exemple, SHEPHERD [82] et GAVRIKOV [165]. Ainsi :

$$\bar{\lambda}_C = k \bar{\ell}_Z, \quad (5.1)$$

$$\bar{\ell}_Z = \bar{\ell}_{ZI} \text{ ou } \bar{\ell}_Z = \bar{\ell}_{ZI} + \delta\bar{\ell}_{ZR}. \quad (5.2)$$

Les définitions de  $\bar{\ell}_{ZI}$  et  $\delta\bar{\ell}_{ZR}$  varient aussi selon les auteurs. Les profils ZND de température et de thermicité en figure 5.1 en illustrent quelques unes.

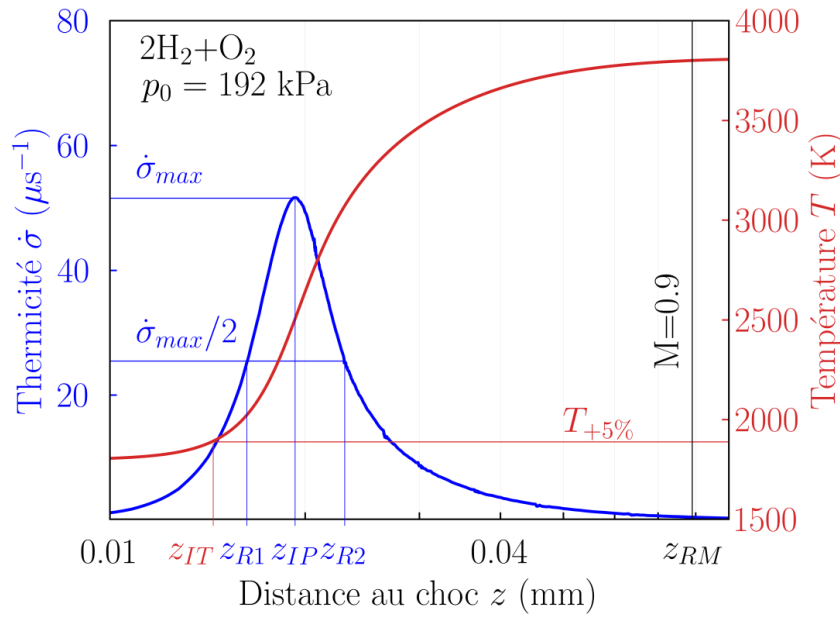


FIGURE 5.1 – Profils ZND de thermicité et de température typiques illustrant les diverses définitions des longueurs d'induction et épaisseurs de réaction.

Mathématiquement, la zone d'induction devrait être obtenue par analyse asymptotique, ce qui donne nécessairement comme temps d'induction  $\bar{t}_{ZI}$  la quantité  $1/(d\dot{\sigma}/dt)/\dot{\sigma}_N$ , où l'indice N désigne l'état au choc ZND. Avec les notations de la figure 5.1, les estimations pratiques de  $\bar{\ell}_{ZI}$  sont les distances au choc de la position correspondant à l'élévation de température de 5% [155] ( $z_{IT}$ ) ou au maximum de thermicité [22] ( $z_{IP}$ ), cette dernière étant souvent peu discernable de la position du maximum de gradient de température  $z_{IP}$ . SHORT et SHARPE [97] définissent l'épaisseur de réaction principale  $\delta\bar{\ell}_{ZR}$  comme la distance entre les positions où le nombre de Mach atteint 0,9 et où le gradient de température est maximal ( $z_{RM} - z_{IP}$ ). RADULESCU et al. [100] et NG et ZHANG [23] la définissent par le rapport  $U_*/\dot{\sigma}_{max}$ , *i.e.* le produit d'une vitesse matérielle caractéristique et d'un temps caractéristique égal à l'inverse de la thermicité maximale. RADULESCU et al. considèrent que  $U_*$  est égal à la vitesse de la matière à la position du maximum de thermicité, NG et

ZHANG celle des gaz brûlés à l'état CJ. CRANE et al. [155] prennent  $\delta\bar{\ell}_{ZR}$  égal à la largeur du profil de thermicité à sa mi-hauteur ( $z_{R2} - z_{R1}$ ). Les choix des épaisseurs d'induction et de réaction principale doivent exclure les disjonctions et les intersections. Ces choix sont faits *a priori*, de sorte que l'utilisation prédictive de la relation de proportionnalité (5.2) nécessite d'abord l'ajustement du coefficient  $k$  aux largeurs de cellule mesurées et la construction de tableaux par catégorie de mélanges [166]. Le rapport  $k = \bar{\lambda}_C/\bar{\ell}_Z$  peut donc être très sensible au choix de  $\bar{\ell}_Z$  ou du mécanisme cinétique chimique. Par exemple, pour des mélanges proches de la stœchiométrie dont le combustible est  $H_2$ ,  $C_2H_2$  ou  $C_2H_4$  et l'oxydant est l'oxygène ou l'air,  $k \approx 29$  lorsque  $\bar{\ell}_Z = \bar{\ell}_{ZI}$ , et  $k \approx 10$  lorsque  $\bar{\ell}_Z = \bar{\ell}_{ZI} + \delta\bar{\ell}_{ZR}$ , *e.g.*, [155]. Cette approche a certes l'avantage de la simplicité et du sens physique, mais la relation (5.2) est une corrélation postulée dont l'utilisation à fin de prédiction nécessite préalablement des mesures expérimentales. Enfin, sa forme fonctionnelle, son coefficient de proportionnalité  $k$  et sa longueur caractéristique  $\bar{\ell}_Z$  ne sont pas déduits conjointement et explicitement d'une analyse des mécanismes cellulaires réels.

L'approche que nous proposons est une synthèse intermédiaire entre le troisième et le quatrième groupe. Son apport consiste en un système fermé d'équations qui détermine conjointement les propriétés géométriques moyennes de la cellule, soit sa configuration en vue frontale, la longueur  $\bar{L}_C$ , la largeur  $\bar{\lambda}_C$  et le rapport d'aspect  $a$  des cellules, et les longueurs et temps caractéristiques ZND associés, soit les épaisseurs et temps d'induction et de réaction principale ( $\bar{\ell}_{ZI}$ ,  $\delta\bar{\ell}_{ZR}$ ,  $\bar{t}_{ZI}$  et  $\delta\bar{t}_{ZR}$ ) et les longueurs et temps représentatifs de réaction complète  $\bar{\ell}_Z$  et  $\bar{t}_Z$ , sans postuler l'un ou l'une pour obtenir les autres et sans simplifier le mécanisme de cinétique chimique. Son principe est l'inverse de celui du second groupe. Le front est directement traité comme multicellulaire au sens des deux limites des temps longs et des grandes dimensions transversales, à savoir un grand ensemble de motifs irréguliers évoluant comme un système ergodique stationnaire dont la moyenne est le processus ZND. Cela permet une analyse probabiliste (5.3.3) sans recours à des hypothèses simplificatrices similaires à celles du troisième groupe. Par rapport à ce dernier, notre modèle déduit et, donc, justifie la relation de proportionnalité (5.1) à partir de l'équivalence globale nécessaire des taux de réaction cellulaire et ZND. Elle détermine ensuite par analyse de probabilité la valeur de la fraction massique brûlée moyenne donnée puis le coefficient de proportionnalité  $k$  en fonction des propriétés du choc et Chapman-Jouguet.

En substance, notre modèle met en œuvre une approche probabiliste exprimant l'équivalence des mécanismes de combustion cellulaires et ZND afin que leurs fronts puissent se propager à la même vitesse moyenne. La validité de cette équivalence est ici limitée aux détonations multicellulaires à mécanisme cellulaire adiabatique.

## 5.2 Équivalence des processus cellulaires et ZND

L'hypothèse fondamentale est que les processus cellulaire et ZND doivent brûler une même masse de gaz frais à la même vitesse, pour une période suffisamment longue et pour une section de tube identique, de manière à assurer la même célérité de propagation. Le modèle ZND est ici celui pour une détonation à vitesse constante, *i.e.* une zone de réaction 1D plane stationnaire précédée d'un choc de vitesse constante  $D$  (section 2.3). Ce processus ZND est valable, en moyenne, pour une détonation multicellulaire si le nombre de cellules est suffisamment grand.

Nous prenons comme origine des distances  $x$  dans le référentiel du laboratoire une position arbitraire initiale  $L_0 = 0$  du front ZND et comme origine correspondante des temps  $t$  l'instant  $t_0 = 0$  auquel un élément de fluide entre dans la zone de réaction ZND. Ainsi, pour tout instant  $t \geq 0$ , la position du front dans le référentiel du laboratoire est  $L(t) = Dt$  et la distance mesurée depuis le front est  $z(t) = Dt - x$ . La stationnarité de la zone de réaction ZND est l'invariance de toute fonction  $f$  par rapport à la position  $L(t)$  du front. Une fonction  $f$  ne dépend donc que d'une seule variable indépendante, soit la distance  $z$  parcourue par un élément fluide ou le temps  $t$  mis par cet élément pour atteindre la position  $z$ . Cette position parcourue et ce temps écoulé depuis le passage de l'élément fluide à travers le choc, sont calculés par intégration de la vitesse matérielle du modèle ZND (section 2.3). Ils sont dénotés  $z_m(t)$  et  $t_m(z)$  ci-après.

Nous désignons par durée de réaction complète celle nécessaire pour brûler les particules de gaz frais entrées à  $t = 0$  dans une zone de réaction. En notant  $\bar{t}_C$  la durée durant laquelle le front ZND parcourt la distance  $\bar{L}_C$  représentant la longueur d'une cellule moyenne, alors, si la détonation se propage à une vitesse Chapman-Jouguet (CJ)  $D_{CJ}$ , :

$$\bar{L}_C = D_{CJ} \bar{t}_C. \quad (5.3)$$

Dans le processus ZND, en notant  $\bar{t}_Z$  son temps représentatif de réaction complète, les particules fluides capturées par le front entre  $0 < t \leq \bar{t}_Z$  ne peuvent être que partiellement brûlées à  $t = \bar{t}_Z$  (figure 5.2, gauche). Cela résulte en une fraction massique moyenne ZND égale à  $\bar{y}_Z$  et, donc, à un taux massique moyen de réaction ZND égal à  $\bar{y}_Z/\bar{t}_Z$  sur l'intervalle  $[0; \bar{t}_Z]$ .

Dans le processus cellulaire, le front est un ensemble d'ondes convexes frontales, *i.e.* se propageant vers l'avant, dont la vitesse de chacune varie cycliquement mais aléatoirement autour de la vitesse moyenne ZND, *e.g.* [96], ici  $D_{CJ}$ . Elles ont pour bords leurs intersections

avec les ondes transverses balayant la surface des ondes frontales les plus lentes. Pour les mélanges réactifs dont les enregistrements longitudinaux ne montrent pas de cellules trop irrégulières, tels qu'avec les combustibles  $H_2$  ou les hydrocarbures plus lourds  $C_2H_4$  et  $C_3H_8$ , les visualisations par caméra ultra-rapide [70-72] montrent que le taux de combustion est beaucoup plus rapide dans les zones situées derrière les ondes transverses et les plus rapides des ondes frontales, et pratiquement négligeable ailleurs. Ainsi, dans ces zones, le mécanisme dominant de combustion est un amorçage de type compression adiabatique par choc suivie d'une décomposition chimique très rapide (figure 5.2, droite).

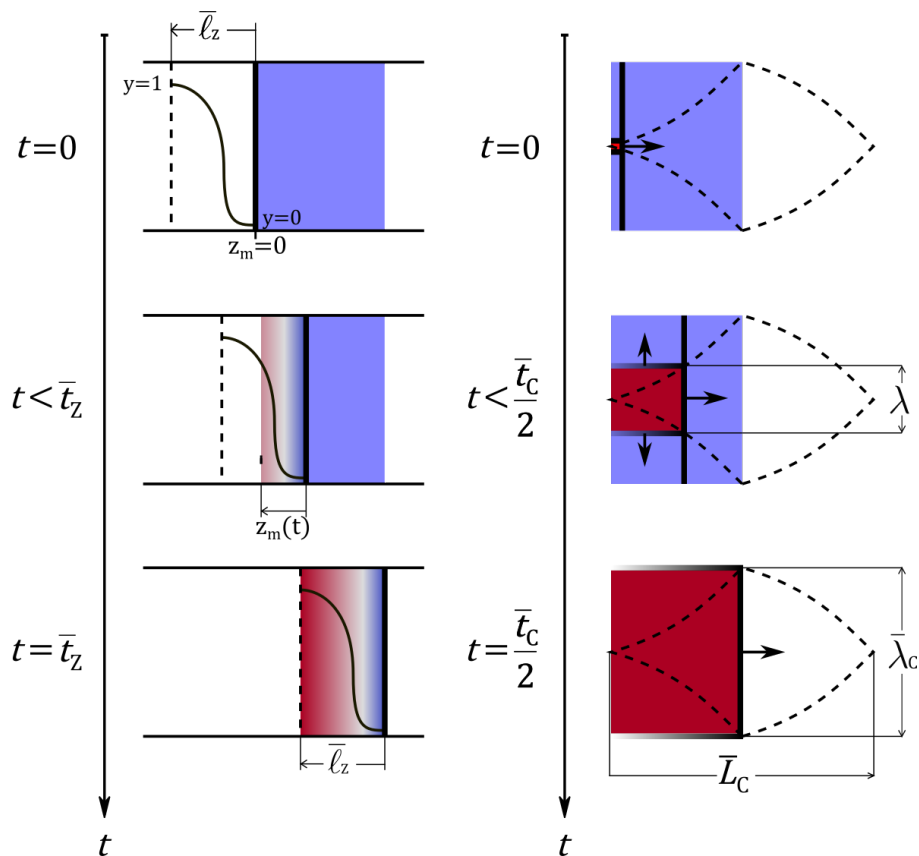


FIGURE 5.2 – Gauche : processus ZND. Droite : processus cellulaire adiabatique limite

Un argument de symétrie impose alors que, pour ce processus cellulaire, le temps représentatif de réaction complète, tel que défini ci-dessus, est  $\bar{t}_C/2$ . C'est en effet celui nécessaire aux ondes transverses pour balayer la surface de la cellule moyenne, ce qui, par symétrie donc, n'est réalisé que lorsque le front moyen a avancé d'une moitié de longueur de cellule  $\bar{L}_C/2$ . Ainsi, sur l'intervalle  $[0; \bar{t}_C/2]$ , la totalité du volume de gaz frais capturé par une surface moyenne de cellule est brûlée, longitudinalement pour sa partie capturée par les ondes frontales les plus rapides, transversalement pour sa partie capturée par les ondes frontales les plus lentes. La conséquence est que, pour ce mécanisme cellulaire adiabatique, *i.e.* à amorçage très rapide par choc, sur l'intervalle  $[0; \bar{t}_C/2]$ , la fraction massique moyenne



de gaz brûlé est  $\bar{y}_C$  mais le taux massique moyen de réaction est  $1/(\bar{t}_C/2)$ , soit  $2/\bar{t}_C$ , et non  $\bar{y}_C \times 2/\bar{t}_C$ .

Les moyennes des fractions massiques de gaz brûlé  $y_C$  et  $y_Z$  sont définies par :

$$\bar{y}_Z = \frac{1}{\bar{t}_Z} \int_0^{\bar{t}_Z} y_Z(t) dt, \quad \bar{y}_C = \frac{2}{\bar{t}_C} \int_0^{\bar{t}_C/2} y_C(t) dt, \quad (5.4)$$

où les indices Z et C désignent respectivement les processus ZND et cellulaire. Ces moyennes s'appliquent aussi à toute variable, par exemple la vitesse matérielle  $U_Z(t) = dz_m(t)/dt$  à un instant  $t$  ou à la position matérielle  $z_m(t)$  d'un élément fluide, d'où la longueur représentative de réaction complète ZND :

$$\bar{\ell}_Z = \int_0^{\bar{t}_Z} U_Z(t) dt = \bar{U}_Z \bar{t}_Z, \quad \bar{U}_Z = \frac{\bar{\ell}_Z}{\bar{t}_Z}, \quad (5.5)$$

où  $\bar{U}_Z$  désigne la moyenne de  $U_Z(t)$ . En désignant par  $v$  le volume massique et par  $v_0$  sa valeur initiale, la conservation de la masse pour le processus ZND :

$$v_Z D_{CJ} = v_0 U_Z, \quad (5.6)$$

donc valable à toute position  $z_m(t)$ , peut aussi être moyennée, et (5.5) et (5.6) se réécrivent :

$$\bar{\ell}_Z = \frac{\bar{v}_Z}{v_0} D_{CJ} \bar{t}_Z, \quad (5.7)$$

$$\bar{v}_Z(\bar{y}_Z) = (1 - \bar{y}_Z) v_N + \bar{y}_Z v_{CJ}, \quad (5.8)$$

$$\bar{U}_Z(\bar{y}_Z) = (1 - \bar{y}_Z) U_N + \bar{y}_Z U_{CJ}. \quad (5.9)$$

La relation (5.8) résulte de (5.6) et de la moyenne de la contrainte d'additivité des volumes  $v = \sum y_i v_i$ , où  $v_i$  et  $y_i$  sont le volume spécifique et la fraction massique de l'espèce chimique  $i$ , et  $v_N$  et  $v_{CJ}$  les volumes massiques au choc ZND (indice N) et en fin de réaction (indice CJ).

La zone de réaction ZND est ainsi représentée par une couche d'induction inerte et une couche de réaction principale concentrant la masse brûlée. Leurs masses par unité de surface sont, respectivement,  $M_N = (U_N/v_N)t_{ZI}$  et  $M_B = (U_{CJ}/v_{CJ})\delta\bar{t}_{ZR}$ , avec  $t_{ZI}$  et  $\delta\bar{t}_{ZR}$  leurs durées de traversée ( $\bar{t}_Z = t_{ZI} + \delta\bar{t}_{ZR}$ ). Puisque  $U/v$  est constant (équation 5.6), la fraction massique moyenne est le rapport  $\bar{y}_Z = M_B/M_Z = \delta\bar{t}_{ZR}/\bar{t}_Z$ , où  $M_Z = M_N + M_B = (\bar{U}_Z/\bar{v}_Z)\bar{t}_Z$  est la masse totale dans la zone de réaction ZND.

L'égalité des taux moyens de réaction des processus ZND et cellulaire implique celle de leurs variables d'avancement moyennes  $\bar{y}_C$  et  $\bar{y}_Z$  par rapport à leurs temps caractéristiques

de réaction  $\bar{t}_C/2$  et  $\bar{t}_Z$ , et nous soulignons que ces temps sont différents. Ainsi :

$$\frac{2}{\bar{t}_C} = \frac{\bar{y}}{\bar{t}_Z}, \quad (5.10)$$

où  $\bar{y} = \bar{y}_C = \bar{y}_Z$ . La combinaison de (5.3) et (5.10) donne la relation (5.11) entre la longueur moyenne de cellule  $\bar{L}_C$  et la durée représentative de réaction complète ZND  $\bar{t}_Z$ , et la combinaison de (5.7) et (5.8) donne la relation (5.12) entre  $\bar{L}_C$  et la longueur représentative de réaction complète ZND  $\bar{\ell}_Z$  :

$$\bar{L}_C(\bar{y}, \bar{t}_Z) = k_1 \bar{t}_Z, \quad k_1(\bar{y}) = \frac{2}{\bar{y}} D_{CJ}, \quad (5.11)$$

$$\bar{L}_C(\bar{y}, \bar{\ell}_Z) = k_2 \bar{\ell}_Z, \quad k_2(\bar{y}) = \frac{2}{\bar{y}} \frac{v_0}{v_Z(\bar{y})}. \quad (5.12)$$

Dans la section suivante (section 5.3), des éléments de théorie des graphes sont utilisés pour définir un pavage régulier équivalent à celui d'une vue frontale à motifs irréguliers. Des éléments de probabilités géométriques appliquées à une cellule de ce pavage équivalent donne alors la valeur de la fraction massique moyenne brûlée  $\bar{y} \approx 0,385$  et le rapport d'aspect de cette cellule  $a = \bar{\lambda}_C/\bar{L}_C \approx 0,64$ . La largeur moyenne de cellule  $\bar{\lambda}_C$  ainsi que les temps et longueur caractéristiques ZND  $\bar{t}_Z$  et  $\bar{\ell}_Z$  sont alors définis par l'intersection des courbes  $\lambda_1(z)$  et  $\lambda_2(z)$  :

$$\lambda_1(z) = a k_1 t_m(z), \quad (5.13)$$

$$\lambda_2(z) = a k_2 z, \quad (5.14)$$

ou des courbes  $\lambda_1(t)$  et  $\lambda_2(t)$  :

$$\lambda_1(t) = a k_1 t, \quad (5.15)$$

$$\lambda_2(t) = a k_2 z_m(t), \quad (5.16)$$

ce que la figure 5.3 illustre.

L'intersection de  $\lambda_1$  et  $\lambda_2$  exprime la contrainte de compatibilité pour que le processus cellulaire produise la même masse de gaz brûlé à  $\bar{t}_C$  que le processus ZND à  $\bar{t}_Z = t_m(z = \bar{\ell}_Z)$ . La fonction  $t_m(z)$  dans (5.13) est la relation temps-position d'un élément fluide dans la zone de réaction ZND, soit le temps mis par cet élément pour atteindre la position  $z$ . La fonction  $z_m(t)$  dans (5.16) est la position de cet élément à l'instant  $t$ . Ces fonctions et les valeurs de  $v_N$ ,  $v_{CJ}$  et  $D_{CJ}$  sont déterminées numériquement lors du calcul de la zone de réaction ZND (section 2.3). La procédure d'obtention de  $\bar{\lambda}_C$  est donc un simple post-

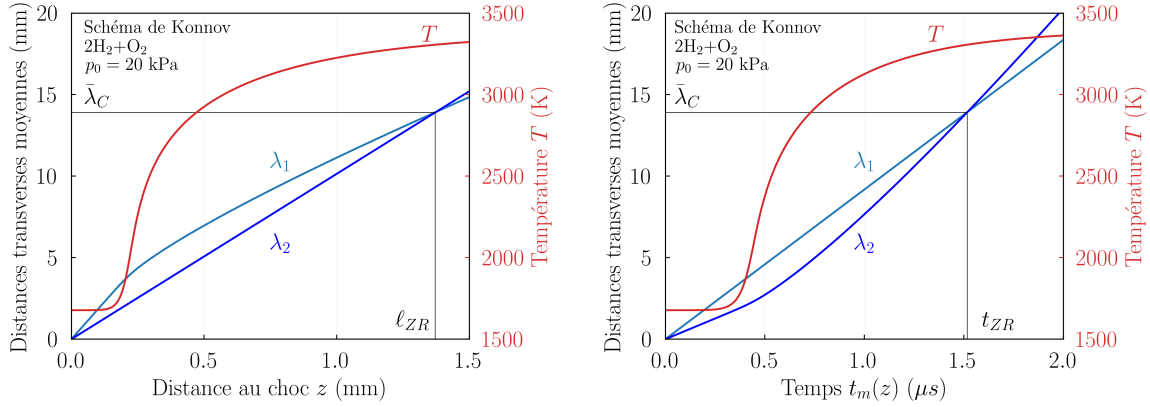


FIGURE 5.3 – Profil ZND (gauche) et évolution matérielle (droite) de la température  $T$  (courbes rouges, coordonnées à droite) et de la distance des ondes transverses moyenne  $\lambda_1$  and  $\lambda_2$  (courbes bleue et verte, coordonnées à gauche). L'intersection de  $\lambda_1$  et  $\lambda_2$  donne la largeur moyenne de cellule  $\bar{\lambda}_C$  et les longueur  $\bar{\ell}_Z$  et temps  $\bar{t}_Z$  ZND caractéristiques.

traitement des résultats ZND qui revient à trouver le point où le rapport position/temps  $z_m(t)/t$  d'un élément fluide est égal à la vitesse matérielle moyenne  $\bar{U}_Z$  (5.9), compte-tenu des valeurs déjà connues de  $\bar{y}$ ,  $v_N$  et  $v_{CJ}$ . Ce point définit alors  $\bar{\ell}_Z$  et  $\bar{t}_Z$  lesquels multipliés respectivement par  $ak_1$  et  $ak_2$  donnent, l'un ou l'autre,  $\bar{\lambda}_C$ .

Avec les relations (5.6), (5.8) et (5.10),  $\bar{y}$  donne aussi la fraction volumique brûlée  $\bar{\nu}$  définie par

$$\bar{\ell}_{ZI} = U_N \bar{t}_{ZI} = (1 - \bar{\nu}) \bar{\ell}_Z \quad (5.17)$$

$$\delta \bar{\ell}_{ZR} = U_{CJ} \delta \bar{t}_{ZR} = \bar{\nu} \bar{\ell}_Z \quad (5.18)$$

$$\bar{\nu} = \frac{\delta \bar{\ell}_{ZR}}{\bar{\ell}_Z} = \bar{y} \frac{v_{CJ}}{\bar{v}_Z(\bar{y})}. \quad (5.19)$$

De plus, le modèle corrobore la relation de proportionnalité (5.1) entre la largeur moyenne des cellules  $\bar{\lambda}_C$  et une longueur chimique caractéristique de la zone de réaction ZND, et le fait que cette longueur est représentative de la réaction complète, c'est-à-dire qu'elle doit inclure les deux épaisseurs d'induction et de réaction principale, *i.e.*  $\bar{\ell}_Z = \bar{\ell}_{ZI} + \delta \bar{\ell}_{ZR}$  et donne le coefficient de proportionnalité  $k = ak_2$  en fonction de la fraction massique moyenne  $\bar{y}$  et des volumes spécifiques initial, sous choc et CJ, soit, respectivement,  $v_0$ ,  $v_N$  et  $v_{CJ}$ .

## 5.3 Description statistique des cellules de détonation

### 5.3.1 Ergodicité et cellules de détonation

En théorie des probabilités, stochasticité signifie non-déterminisme. C'est le cas pour les vues frontales de cellules de détonation à formes irrégulières du fait de leur grande sensibilité aux conditions initiales et aux conditions aux limites. Aucune répétition d'une expérience - physique ou numérique - ne peut réaliser la même position, taille ou orientation d'un même motif, soit un rectangle, un triangle ou un hexagone, à la même distance de l'allumage, au sens strict.

L'ergodicité est l'hypothèse selon laquelle un nombre suffisant d'éléments régis par un processus stochastique ont des propriétés temporelles et statistiques moyennes identiques, de sorte qu'une seule réalisation d'un nombre suffisant d'éléments en détermine la moyenne. Des prédictions correctes sont généralement le seul support de cette hypothèse. Ici, cela signifie que les propriétés moyennes des motifs sur le front à un moment donné sont statistiquement les mêmes que celles obtenues sur tous les fronts jusqu'à ce moment.

L'ergodicité est stationnaire si les moyennes sont indépendantes de l'instant d'échantillonnage. C'est le cas pour celles des vues frontales irrégulières enregistrées suffisamment loin de l'allumage dans un tube suffisamment large, étant donnée une composition réactive et ses pression et température initiales. Les échantillons sont les positions, tailles et orientations des motifs et donc les longueurs et orientations de leurs bords à une certaine position de l'amorçage. Ainsi, toute vue frontale enregistrée à une position plus éloignée au cours de cette expérience, ou à la même position dans d'autres expériences, donnera des distributions identiques, c'est-à-dire le même nombre de triangles, de rectangles, d'hexagones, d'arêtes, *etc.*

### 5.3.2 Théorie des graphes et pavage cellulaire

L'analyse des enregistrements frontaux expérimentaux des cellules indique que l'influence de la forme de la section du tube sur les motifs cellulaires diminue avec l'augmentation du rapport de ses dimensions transversales et de largeur des cellules (section 4.4). Au-dessus d'une valeur limite de nombre de cellules, toutes les vues frontales montrent une irrégularité similaire, quelle que soit la forme de la section du tube, c'est-à-dire sans périodicité évidente des positions relatives des bords des cellules. Paradoxalement, les enregistrements longitudinaux montrent, pour  $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 2\text{Ar}$ , les arrangements lon-

gitudinaux réguliers classiques en forme de losange typiques de ce mélange stable, tant en dessous qu'au-dessus de la limite d'influence de la forme de la section transversale. Les enregistrements longitudinaux ne peuvent donc pas caractériser seuls la structure cellulaire. La détermination des largeurs et formes moyennes indépendantes de l'aire de la section transversale du tube nécessite des mesures avec différentes formes de sections transversales et en augmentant  $p_0$  (Figure 4.9). En effet, les largeurs moyennes obtenues à partir des enregistrements longitudinaux convergent avec l'augmentation de  $p_0$ .

Le principe ergodique (5.3.2) traduit ici le fait que plusieurs enregistrements frontaux obtenus avec la même composition et le même  $p_0$  suffisamment grand, c'est-à-dire pour un très grand nombre  $F$  de cellules, présentent les mêmes distributions statistiques de différents motifs cellulaires (triangle, carré, pentagone, hexagone, *etc*). De manière équivalente, aux grands  $F$ , la distribution frontale d'un même motif, est statistiquement indépendante de l'instant d'impact de fronts cellulaires générés dans plusieurs expériences réalisées dans les mêmes conditions. Des éléments de la théorie des graphes [167] peuvent alors être utilisés pour obtenir une équivalence à cette distribution de motifs. Les ondes transverses sont ainsi vues comme les arêtes, et les motifs cellulaires les faces, d'un graphe plan dont la face de fermeture est l'enveloppe bornée par les parois du tube.

Le nombre de sommets  $S$ , d'arêtes  $A$  et de faces  $F$  d'un graphe plan sont liés par la formule d'Euler-Poincaré :

$$S - A + F = 2 \quad (5.20)$$

Ces nombres sont aussi liés par une contrainte d'assemblage exprimant que chaque face est partagée par au moins trois arêtes, soit :

$$2A - 3S = k \geq 0 \quad (5.21)$$

où  $k$  est le nombre d'arêtes surnuméraires à 3 sur un sommet. La combinaison des équations (5.20) et (5.21) donne le nombre d'arêtes par faces moyen :

$$\frac{2A}{F} = 6 \left( 1 - \frac{2}{F} \right) - \frac{2k}{F} \quad (5.22)$$

Nous avons montré dans l'analyse de nos résultats expérimentaux (sous-section 4.1.2) que les lieux d'intersections des ondes transverses ne peuvent comprendre que 3 ondes, d'où :

$$\frac{2k}{F} \ll 1 \text{ et } \lim_{F \rightarrow \infty} \frac{2A}{F} = 6. \quad (5.23)$$

Ainsi, aux grands nombres  $F$  de cellules, c'est-à-dire, loin de l'influence du tube, un réseau d'hexagones est équivalent au pavage réel des vues frontales du front cellulaire.

La périodicité  $\bar{t}_C/2$  du processus cellulaire moyen (section 5.2) et l'ergodicité permettent alors de considérer ces cellules représentatives arrangées en un empilement hexagonal compact (HC), comme illustré en figure 5.4.

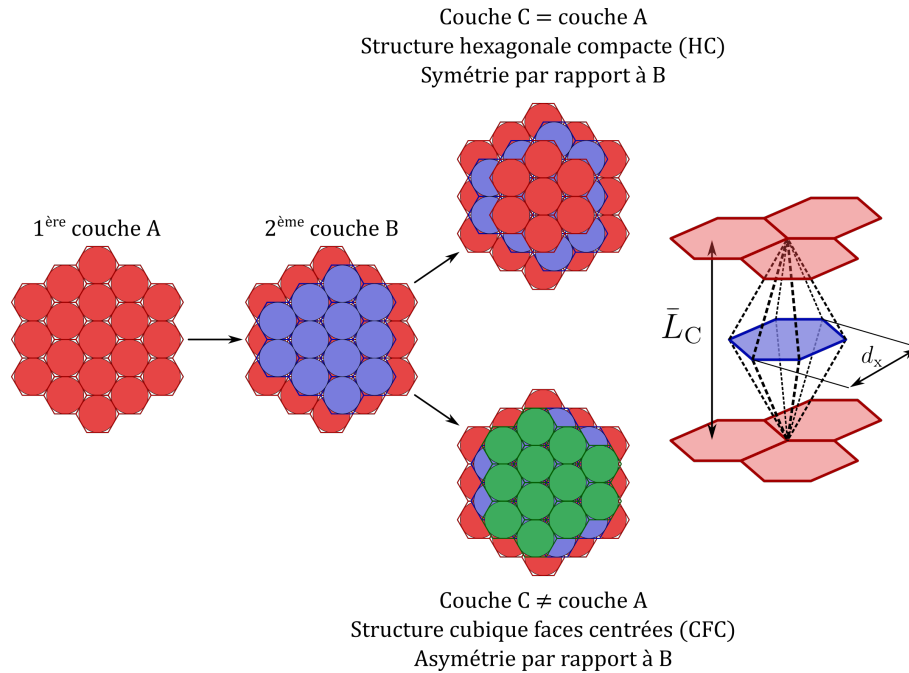


FIGURE 5.4 – Empilement hexagonal compact (la symétrie de la cellule statistiquement représentative rend l'empilement CFC non-physique).

Le rapport d'aspect représentatif largeur/longueur de cellule est donc :

$$a = \frac{\bar{\lambda}_C}{\bar{L}_C} = \frac{3 \ln 3}{\pi} \sqrt{\frac{3}{8}} \approx 0.64244 \quad (5.24)$$

Il correspond à un losange d'angle au sommet  $65,4^\circ$ , valeur moyenne bien en accord avec les mesures sur les enregistrements longitudinaux sur dépôt de carbone (section 4).

### 5.3.3 Probabilités géométriques et processus cellulaire

Nous définissons d'abord un volume de contrôle avec la surface  $A_C$  et la demi-longueur  $\bar{L}_C/2$  de la cellule moyenne. Nous désignons par  $M_C$  la masse contenue dans ce volume,  $M(t)$  la masse captée par la surface  $A_C$  durant la période  $[0; \bar{t}_C/2]$ , soit quand le front a parcouru la distance  $L(t) = Dt \leq \bar{L}_C/2$ , et, respectivement  $A_B(t)$  et  $M_B(t)$  la surface balayée et la masse brûlée par les ondes transverses sur cette durée (figure 5.2, gauche).

Ces masses s'écrivent

$$M_C = \rho_0 A_C \frac{\bar{L}_C}{2}, \quad M(t) = \rho_0 A_C L(t), \quad M_B(t) = \rho_0 A_B(t) L(t), \quad (5.25)$$

où  $\rho_0 = 1/v_0$  est la masse spécifique initiale. Ainsi, la fraction massique de gaz brûlé  $y_C$  est

$$y_C(t) = \frac{M_B(t)}{M(t)} = \frac{A_B(t)}{A_C}, \quad (5.26)$$

qui montre que  $\bar{y}_C$  est la moyenne de l'aire de combustion par rapport à  $A_C$ .

Nous exprimons ensuite l'ergodicité stationnaire des ondes transverses vues comme un ensemble de segments linéaires de différentes longueurs. Nous supposons donc que les longueurs et orientations successives des segments au cours du temps sur la période  $\bar{t}_C/2$  dans une même expérience sont statistiquement identiques à celles d'une expérience à une autre à une même abscisse de leurs propagations, et ce, bien sûr, pour le même mélange et les mêmes pression et température initiales. Cette description assure que l'efficacité de combustion est, en moyenne, indépendante de l'expérience et de la position du front, comme illustré en figure 5.5. Cela revient à admettre que chaque onde transverse se comporte comme un segment jeté aléatoirement sur la surface du front statistiquement équivalent, et donc que  $\bar{y}_C$  est la probabilité que les segments sont entièrement contenus dans un élément du pavage hexagonal, *i.e.* la probabilité de non-intersection du segment avec le pavage hexagonal : un segment, une onde transverse donc, suit l'expérience mathématique de l'aiguille de Buffon étendue aux pavage de polyèdres.

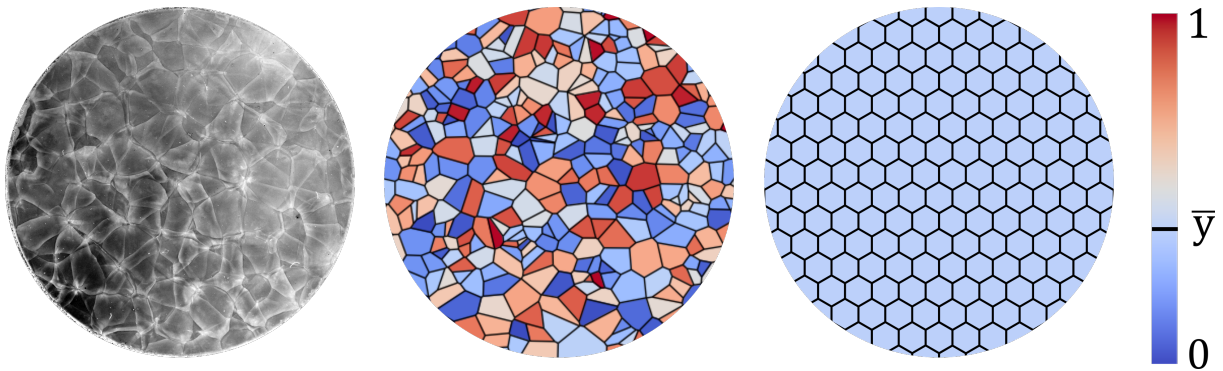


FIGURE 5.5 – Enregistrements frontaux d'une structure cellulaire. Gauche : enregistrement expérimental d'une détonation de  $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 2\text{Ar}$  à  $p_0 = 30\text{ kPa}$  dans le tube rond R. Milieu : schéma d'un graphe représentant un front de détonation où les couleurs représentent des valeurs aléatoires de  $y(t)$  au moment de l'enregistrement. Droite : pavage statistiquement équivalent, et où la valeur moyenne  $\bar{y}$  est représentée par sa couleur.

Les problèmes d'aiguilles de Buffon expriment la probabilité de non-intersection comme un rapport des mesures  $\mu_C/\mu$ . La mesure  $\mu$  est l'hyper-volume de l'espace de toutes les valeurs aléatoires possibles des variables indépendantes, et  $\mu_C$  celle du sous-espace des

valeurs qui assurent la non-intersection des segments avec les arêtes du polyèdre. Les variables indépendantes sont l'angle d'orientation, la longueur maximale et les coordonnées du centre du segment, pour le polyèdre donné. La contrainte de non-intersection confine le centre dans un polyèdre plus petit dont la forme et la surface dépendent de l'orientation et de la longueur du segment. Pour l'hexagone, nous étendons ci-dessous à un segment de longueur variable la solution de VASSALLO [168] pour un segment de longueur constante. Nous ne reproduisons pas ici cette solution très lisiblement et clairement exposée dans son article. L'hexagone a une aire  $A_C = (3\sqrt{3}/2) \times (d_x/2)^2$ , où  $d_x$  est le diamètre du cercle circonscrit de l'hexagone, l'angle d'orientation du segment est compris dans  $[0, 2\pi]$  et sa longueur  $s$  dans  $[0; d_x]$ . La mesure est donc  $A_C \times 2\pi \times d_x = 6\pi\sqrt{3}(d_x/2)^3$ . En normalisant la longueur du segment par le côté de l'hexagone  $d_x/2$ , et en notant  $r = 2s/d_x$  les longueurs adimensionnées de segments, il vient :

$$\mu = 6\pi\sqrt{3}, \quad \mu_C = \mu_1 + \mu_2 + \mu_3, \quad \mu_i = \int_{r_{i1}}^{r_{i2}} m_i(r) dr, \quad (5.27)$$

$$r \in [r_{11} = 0, r_{12} = 1], \quad m_1(r) = 3\pi\sqrt{3} - 12r + r^2 \left(3 - \pi/\sqrt{3}\right), \quad (5.28)$$

$$r \in [r_{21} = 1, r_{22} = \sqrt{3}], \quad m_2(r) = \pi\sqrt{3}(r^2 + 5) - 9\sqrt{4r^2 - 3} \dots \\ \dots - 2\sqrt{3}(3 + 2r^2) \arcsin\left(\sqrt{3}/2r\right), \quad (5.29)$$

$$r \in [r_{31} = \sqrt{3}, r_{32} = 2], \quad m_3(r) = 2\sqrt{3}(r^2 + 12) \arcsin\left(\sqrt{3}/r\right) \dots \\ \dots + 30\sqrt{r^2 - 3} - (8\pi\sqrt{3} + 18) - r^2 \left(3 + 2\pi/\sqrt{3}\right), \quad (5.30)$$

$$\mu_1 = 10.720, \quad \mu_2 = 1.8374, \quad \mu_3 = 1.1547 \times 10^{-2}, \quad (5.31)$$

où les  $m_i$  sont les mesures de non-intersection de Vassallo pour des longueurs constantes de segments, et les  $\mu_i$  les nôtres pour des longueurs variables dans  $[0; d_x/2]$ ,  $[d_x/2; \sqrt{3}d_x/2]$  et  $[\sqrt{3}d_x/2; d_x]$ . La probabilité de non-intersection, *i.e.* la fraction massique moyenne de gaz brûlé  $\bar{y}$  est donc donnée par les valeurs des mesures, soit :

$$\mu = 32.648, \quad \mu_C = 12.569, \quad \bar{y} = \frac{\mu_C}{\mu} \approx 0.38498. \quad (5.32)$$

Que la fraction massique moyenne brûlée  $\bar{y}$  et donc les rapports de temps  $\bar{t}_C/\bar{t}_Z$ ,  $\delta\bar{t}_{ZR}/\bar{t}_Z$  et  $\bar{t}_{Z1}/\bar{t}_Z$  soient ici des nombres purs, indépendants des propriétés chimiques et physiques du mélange, découle de la combinaison de l'hypothèse du modèle selon laquelle le mouvement de l'onde transversale est un processus ergodique stationnaire avec la limite à grand nombre de cellules de la relation Descartes-Euler-Poincaré. La valeur  $\bar{y} \approx 0.385$  signifie que les temps de traversée des épaisseurs d'induction et de réaction sont, respectivement, les fractions  $\approx 61.5\%$  et  $\approx 38.5\%$  du temps  $\bar{t}_Z$  représentatif de la réaction complète ZND.



Elle indique aussi que le processus cellulaire moyen est  $\bar{t}_C/\bar{t}_Z = 2/\bar{y} \approx 5,2$  plus long que le processus ZND, *i.e.* met  $\approx 5,2$  plus longtemps à achever la combustion. En revanche, les expressions (5.11) et (5.17)-(5.19) indiquent que la fraction volumique moyenne brûlée  $\bar{\nu}$  et les rapports de longueur  $L_C/\bar{\ell}_Z$ ,  $\delta\bar{\ell}_{ZR}/\bar{\ell}_Z$  et  $\bar{\ell}_{ZI}/\bar{\ell}_Z$  dépendent des propriétés CJ et sous choc, et de  $\bar{y}$  (*e.g.*, tableau 5.3, section 5.4).

Nous soulignons que cette description statistique est indépendante du fait que le mécanisme cellulaire soit adiabatique ou non.

## 5.4 Largeurs de cellules calculées et mesurées

Les figures 5.6 et 5.7 comparent les largeurs de cellules prédites par notre modèle aux valeurs mesurées telles que données dans la base de Caltech [78]. La comparaison n'est pertinente que pour un nombre suffisamment grand de cellules sur le front. Nous avons donc retenu les mesures réalisés dans des tubes de dimensions transverses  $d_t$  au moins 10 fois plus grandes que les largeurs de cellules  $\bar{\lambda}_C$ , soit  $d_t/\bar{\lambda}_C \geq \mathcal{O}(10)$ , de sorte qu'il y ait au moins  $\mathcal{O}(100)$  cellules sur le front (section 4.1). Ces mesures sont représentées par des croix rouges (+) et les autres par des croix grises (×). Le choix de la limite  $\mathcal{O}(100)$  est arbitraire et suggéré tant par nos observations pour le mélange  $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 2\text{Ar}$  (section 4.1) que par d'autres [25]. Néanmoins, les expériences restent nécessaires pour s'assurer de la validité de ce critère pour chaque mélange. La table 5.2 rassemble les conditions expérimentales des mélanges de notre comparaison.

Cette précaution permet d'observer effectivement que le modèle fonctionne mieux aux grands nombres de cellules sur le front, donc, *a priori*, quand la géométrie de tube a une influence relative moindre sur le mécanisme cellulaire. Les barres d'erreurs, si présentes, correspondent aux incertitudes rapportées par les auteurs des mesures.

Les calculs ZND nécessaires à la fermeture du modèles (section 5.2) ont été réalisés avec les mécanismes de cinétique chimique de KONNOV [169], SAN DIEGO [170] et FFCM-1 [171]. Nous soulignons que l'objet de l'étude n'est pas de comparer entre elles ou de discuter les propriétés intrinsèques de ces mécanismes mais d'en apprécier les capacités prédictives par le résultat. La table 5.1 donne les combustibles qu'ils peuvent représenter. Les mélanges retenus ont pour combustibles  $\text{H}_2$ ,  $\text{CH}_4$ ,  $\text{C}_2\text{H}_4$  et  $\text{C}_3\text{H}_8$  et comme comburants l'oxygène pur ou dilué à l'azote dans ses proportions dans l'air ( $\text{Air} = \text{O}_2 + 3,71\text{N}_2 + 0,048\text{Ar}$ ), en raison de leur importance pratique et de l'attention qu'ils ont reçue des cinéticiens. Les données des calculs ZND sont la composition (la richesse  $\phi$ ) du mélange et sa pression et température initiales  $p_0$  et  $T_0$ .

TABLE 5.1 – Compatibilité des combustibles et des schémas cinétiques

Schéma	Symbole	$\text{H}_2$	$\text{C}_3\text{H}_8$	$\text{C}_2\text{H}_4$	$\text{CH}_4$
KONNOV [169]	◆	Oui	Oui	Oui	Oui
SAN DIEGO [170]	●	Oui	Oui	Oui	Oui
FFCM-1 [171]	▲	Oui	Non	Non	Oui

TABLE 5.2 – Dimensions transverses des tubes expérimentaux

Mélange	Auteur(s)	Dimensions de tube (mm)	Référence
H <sub>2</sub> : Air	Stamps (1991)	∅430	[19, 172]
	Guirao (1982)	∅150	[130]
	Tieszen (1986)	∅430	[173]
	Ciccarelli (1994)	∅100	[174]
	Ciccarelli (1997)	∅100	[175]
	Benedick (1984)	1830 × 100	[176]
H <sub>2</sub> : O <sub>2</sub>	Strehlow (1969)	8,255 × 3,81	[93]
	Manzhalei (1974)	∅12, ∅27	[86]
	Desbordes (1990)	∅52	[177]
	Zitoun (1995)	∅200	[178]
	Lee (1977)	∅500	[179, 180]
	Barthel (1974)	76,2 × 25,4	[160]
H <sub>2</sub> + 2 O <sub>2</sub> + 2 Ar	Knystautas (1982)	∅50	[139]
	Strehlow (1969)	8,255 × 3,81	[93]
CH <sub>4</sub> : O <sub>2</sub>	Barthel (1974)	76,2 × 25,4	[160]
	Aminallah (1993)	500 × 500	[181]
	Laberge (1993)	∅44	[182]
	Abid (1991)	∅38	[183]
	Pedley (1988)	∅150	[184]
	Manzhalei (1974)	∅27	[86]
C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> : Air	Knystautas (1982)	∅50	[139]
	Moen (1984)	∅1830	[185]
	Murray (1984)	∅890	[186]
	Knystautas (1982)	∅50	[139]
C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> : O <sub>2</sub>	Bull (1982)	76 × 38	[187]
	Knystautas (1982)	∅50	[139]
	Strehlow (1969)	8,255 × 3,81	[93]
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> : Air	Abid (1991)	∅38	[183]
	Moen (1984)	∅1830	[185]
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> : O <sub>2</sub>	Bull (1982)	76 × 38	[187]
	Knystautas (1982)	∅50	[139]
	Strehlow (1969)	8,255 × 3,81	[93]
	Abid (1991)	∅38	[183]

Deux éléments indépendants déterminent la validité des valeurs calculées de  $\bar{\lambda}_C$ , à savoir les hypothèses du modèle et les mécanismes cinétiques utilisés. Il est difficile d'en distinguer les contributions respectives aux éventuels écarts aux valeurs mesurées en raison de la grande sensibilité des longueurs et temps chimiques ZND aux mécanismes cinétiques, *e.g.*, figures 5.8 et 5.9. Notre approche de ce problème a été de considérer le mélange 2 H<sub>2</sub> + O<sub>2</sub> comme une référence. En effet, d'une part, les losanges représentant les cellules de ce mélange sur les enregistrements longitudinaux sont suffisamment irréguliers sans l'être trop, et leurs largeurs très souvent mesurées, y compris par nous, dans des tubes larges comparés aux cellules et, d'autre part, sa cinétique chimique est bien établie indépendamment du

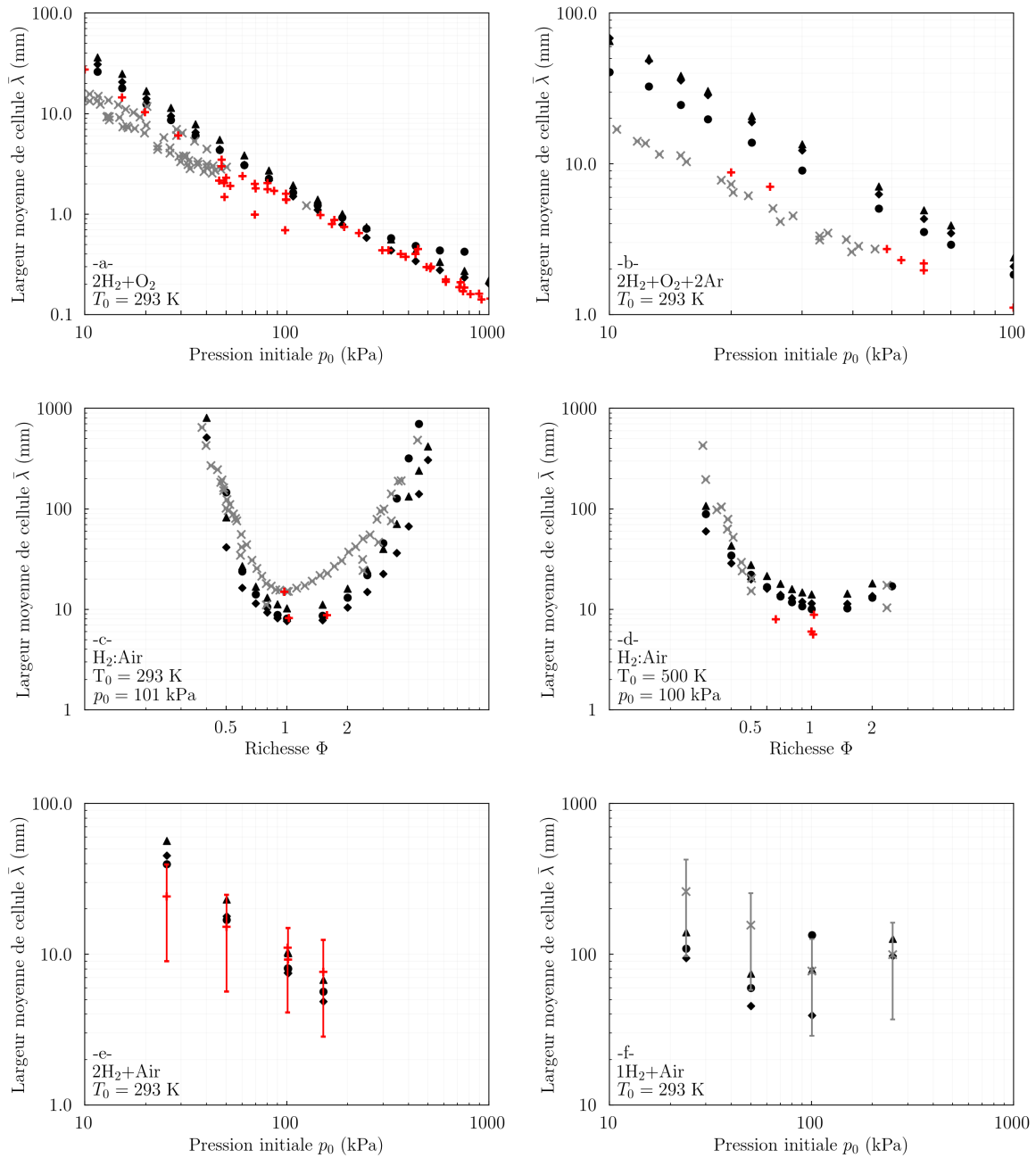


FIGURE 5.6 – Combustible  $\text{H}_2$ . Comparaison entre valeurs mesurées et calculées de  $\bar{\lambda}_C$  pour les schémas cinétiques de KONNOV [169], ( $\blacklozenge$ ), de SAN DIEGO [170] ( $\bullet$ ) et de FFCM-1 [171] ( $\blacktriangle$ ). Croix : mesures en tube large ( $d_t/\bar{\lambda}_C \geq \mathcal{O}(10)$ ,  $+$ ) et mince ( $d_t/\bar{\lambda}_C \leq \mathcal{O}(10)$ ,  $\times$ ).

contexte des études sur les détonations. Ainsi, le très bon accord entre valeurs mesurées et calculées pour le mécanisme le plus réputé pour ce mélange, *i.e.* celui de Konnov [169], mais aussi pour les deux autres, et ce dans une large gamme de variations des pression et température initiales,  $\mathcal{O}(p_0) = [10; 1000]$  kPa, valide les hypothèses du modèle (figure 5.7 a). Cette comparaison favorable s'étend aux mélanges  $\text{H}_2$  :Air selon  $\phi$ ,  $T_0$  et  $p_0$  (figure 5.7 c-e)). Enfin, le rapprochement des figures 5.7 e) et 5.7 f) souligne l'importance de mesures dans des tubes suffisamment larges. En effet, la première montre un bonne comparaison

aux grands nombres de cellules et la deuxième une mauvaise aux petits nombres.

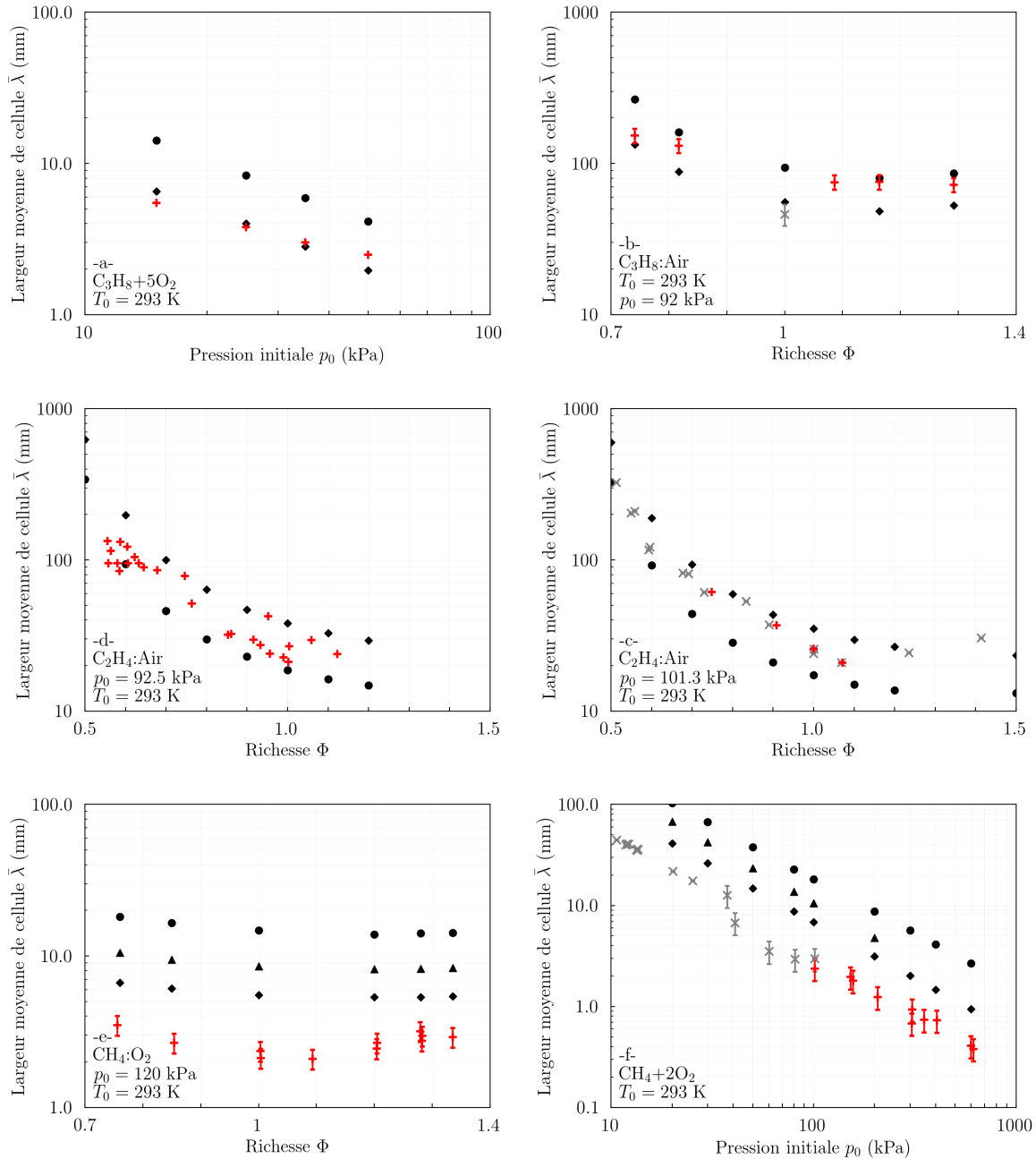


FIGURE 5.7 – Combustibles hydrocarburés. Comparaison entre valeurs mesurées et calculées de  $\bar{\lambda}_C$  pour les schémas cinétiques de KONNOV [169], ( $\blacklozenge$ ), de SAN DIEGO [170] ( $\bullet$ ) et de FFCM-1 [171] ( $\blacktriangle$ ). Croix : mesures en tube large ( $d_t/\lambda_C \geq \mathcal{O}(10)$ ,  $+$ ) et mince ( $d_t/\lambda_C \leq \mathcal{O}(10)$ ,  $\times$ ).

En revanche, la figure 5.6 b montre que les valeurs calculées de  $\bar{\lambda}_C$  pour la grande dilution, 40% mol, par l'argon de  $2H_2 + O_2$  sont trop grandes quel que soit le mécanisme cinétique même si la tendance décroissante avec  $p_0$  et l'ordre de grandeur sont bien restitués. Puisque pour ce mélange, les losanges sur les enregistrements longitudinaux sont très réguliers et que les hypothèses du modèle sont valides pour le mélange plus irrégulier

$2\text{H}_2 + \text{O}_2$ , une interprétation très vraisemblable est que le sous-mécanisme de  $\text{H}_2$  dans chacun des trois mécanismes retenus n'est valable que pour des mélanges pauvres aux grandes dilutions par Ar, *e.g.*, [188]. Ces résultats contribuent à souligner la sensibilité bien connue des résultats de calcul aux mécanismes cinétiques et, donc, le besoin de mécanismes cinétiques plus robustes, *e.g.*, figures 5.8 et 5.9.

Les figures 5.7 a-d pour les mélanges hydrocarburés  $\text{C}_3\text{H}_8$  et  $\text{C}_2\text{H}_4$  montrent un accord aussi bon que pour les mélanges de  $\text{H}_2$  entre valeurs calculées et mesurées malgré une plus grande sensibilité au choix du mécanisme cinétique discutée plus bas (figs. 5.8 et 5.9).

En revanche, les figures 5.7 d et f montrent que les valeurs calculées de  $\bar{\lambda}_C$  pour les mélanges méthane-oxygène  $\text{CH}_4 : \text{O}_2$  sont trop grandes quel que soit le mécanisme cinétique alors que chacun a été capable de prévoir les bonnes largeurs pour les autres hydrocarbures dans des gammes de richesse et de pression initiales similaires. Par conséquent, notre interprétation ici est que l'irrégularité des ces mélanges est trop importante. Dans ce cas, le mécanisme cellulaire de combustion ne fait alors pas intervenir que l'amorçage adiabatique par choc, hypothèse principale de notre modèle, mais aussi la diffusion turbulente, avec combustion retardée de poches de gaz imbrûlés (Sects. 2.4.3 et 5.1). De fait, le mélange  $\text{CH}_4 + 2\text{O}_2$  a la plus grande valeur du nombre  $\chi$  (2.63) de tous les mélanges considérés. NG et ZHANG [23] donnent  $\chi = 52,5$  pour  $\text{CH}_4 + 2\text{O}_2$ ,  $\chi = 16,6$  pour  $\text{C}_3\text{H}_8 + 5\text{O}_2$  et  $\chi = 2,25$  pour  $2\text{H}_2 + \text{O}_2$ .

Les échelles logarithmiques des figures 5.6 et 5.7 permettent de mieux visualiser l'accord sur une large gamme de pressions initiales mais pas d'apprécier finement les différences à une pression initiale donnée. La figure 5.8 montre la sensibilité des évolutions de température  $T$ , de thermicité  $\dot{\sigma}$  et des valeurs calculées de  $\bar{\lambda}_C$  au choix du mécanisme cinétique pour les mélanges propane-oxygène :  $\text{C}_3\text{H}_8 + 5\text{O}_2$  et propane-air :  $1.29\text{C}_3\text{H}_8 + 5\text{Air}$ . La figure 5.9 montre la sensibilité des profils de température et des valeurs calculées de  $\bar{\lambda}_C$  au choix du mécanisme cinétique pour le mélange de référence hydrogène-oxygène  $2\text{H}_2 + \text{O}_2$ . On voit ainsi que les écarts relatifs pour  $\bar{\lambda}_C$  sont faibles devant les incertitudes expérimentales admises (10-30%, [86, 173, 181, 185, 187]).

La table 5.3 détaille les données et résultats de calculs pour les quatre mélanges  $2\text{H}_2 + \text{O}_2$ ,  $2\text{H}_2 + \text{Air}$ ,  $\text{C}_3\text{H}_8 + 5\text{O}_2$  et  $0.95\text{C}_2\text{H}_4 + \text{Air}$  et le mécanisme cinétique de KONNOV. Les différences relatives entre valeurs calculées et mesurées de  $\bar{\lambda}_C$  sont toutes négligeables, ce qui confirme, comme discuté précédemment, l'accord observé sur les figures 5.6 a et c-e et 5.7 a-d. Les valeurs de la fraction volumique moyenne  $\bar{\nu}$  (5.19) et des rapports  $\bar{\lambda}_C/\bar{\ell}_{Z1}$ ,  $\bar{\lambda}_C/\bar{\ell}_Z$  et  $\bar{\ell}_{Z1}/\delta\bar{\ell}_{ZR}$  diffèrent peu d'un mélange à un autre, bien qu'elles soient un peu plus grandes pour  $\text{C}_3\text{H}_8 + 5\text{O}_2$ .

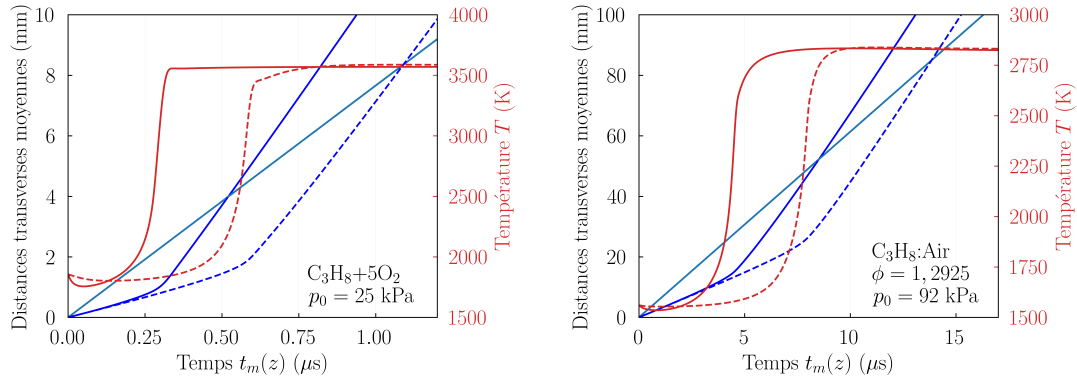


FIGURE 5.8 – Sensibilité des évolutions de température ZND ( $T$ , courbes rouges, coordonnées à droite), des distances d'ondes transverses ( $\lambda_1$  et  $\lambda_2$ , courbes bleues et vertes, coordonnées à gauche), de la largeur moyenne de cellule  $\bar{\lambda}_C$  et de la durée de réaction totale  $\bar{t}_Z$  aux schémas cinétiques de KONNOV (courbes pleines) et de SAN DIEGO (courbes pointillées). Les courbes vertes sont confondues.

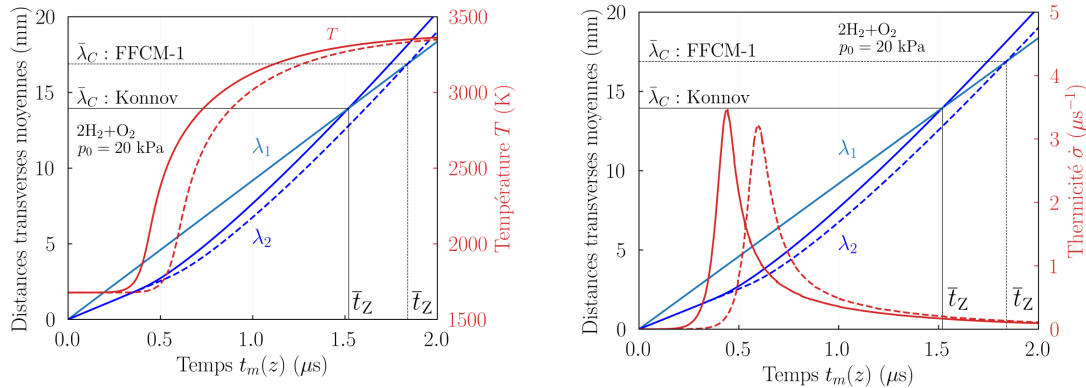


FIGURE 5.9 – Sensibilité des évolutions de température (gauche) ZND ( $T$ , courbes rouges, coordonnées à droite), des distances d'ondes transverses ( $\lambda_1$  et  $\lambda_2$ , courbes bleues et vertes, coordonnées à gauche), de la largeur moyenne de cellule  $\bar{\lambda}_C$  et de la durée de réaction totale  $\bar{t}_Z$  aux schémas cinétiques de KONNOV (courbes pleines) et FFCM-1 (courbes pointillées). Les courbes vertes sont confondues.

Les rapports  $\bar{\lambda}_C/\bar{\ell}_{Z1}$  et  $\bar{\lambda}_C/\bar{\ell}_Z$  ont les grandes valeurs typiques déjà obtenues par les approches par corrélation (Sect. 5.1). Pour ces mélanges, la figure 5.10 montre les profils ZND de température  $T$ , les distances transverses moyennes  $\lambda_1$  et  $\lambda_2$  dont l'intersection définit  $\bar{\lambda}_C$ , et la longueur représentative de réaction complète ZND  $\bar{\ell}_Z$ .

Globalement, le modèle prédit les bonnes valeurs et tendances de  $\bar{\lambda}_C$  pour des cellules sur lesquelles l'influence de la géométrie du tube est négligeable et classifiées de régulière à irrégulière si le mécanisme de cinétique chimique peut décrire la combustion du mélange considéré.

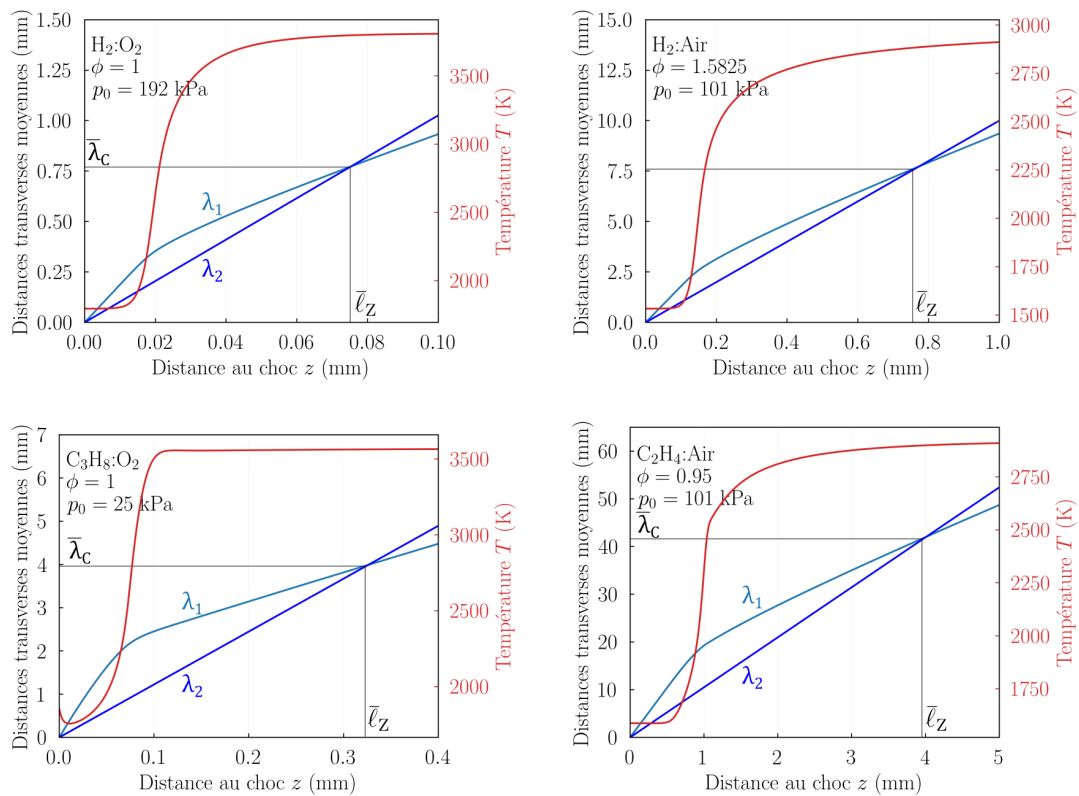


FIGURE 5.10 – Profils ZND de température  $T$  (courbes rouges, coordonnées à droite) et distances transverses moyennes  $\lambda_1$  et  $\lambda_2$  (courbes bleue et verte, coordonnées à gauche) d’après le schéma cinétique de KONNOV.



TABLE 5.3 – Exemples de résultats du calcul avec le schéma de KONNOV [169] (figure 5.3)

		H <sub>2</sub> : O <sub>2</sub>	H <sub>2</sub> : Air	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> : O <sub>2</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> : O <sub>2</sub>
$\phi$		1	1.5828	1	0.95
$p_0$	kPa	192	101	25	101
$v_0$	m <sup>3</sup> /kg	1.056	1.319	2.862	0.911
$v_N$	m <sup>3</sup> /kg	0.188	0.211	0.268	0.146
$v_{CJ}$	m <sup>3</sup> /kg	0.575	0.740	1.537	0.502
$D_{CJ}$	m/s	2873.2	2092.6	2296.0	1805.8
$\bar{t}_Z$	$\mu s$	0.079	1.139	0.514	6.782
$\bar{\ell}_Z$	mm	0.074	0.735	0.318	3.861
$\bar{\lambda}_C$	mm	0.78	7.64	3.98	41.90
$\bar{\lambda}_C^{\text{exp}}$	mm	0.74	8.73	3.80	42.40
$\bar{v}_Z$	m <sup>3</sup> /kg	0.337	0.414	0.756	0.283
$\bar{v}_Z/v_0$		0.319	0.314	0.264	0.311
$\bar{\nu}$	%vol.	0.657	0.687	0.782	0.682
$\bar{\ell}_Z$	mm	0.073	0.749	0.312	3.810
$\bar{\ell}_{ZI}$	mm	0.025	0.234	0.068	1.210
$\delta\bar{\ell}_{ZR}$	mm	0.048	0.515	0.244	2.600
$\bar{\ell}_{ZI}/\delta\bar{\ell}_{ZR}$		0.52	0.45	0.28	0.47
$\bar{t}_{ZI}$	$\mu s$	0.049	0.701	0.316	4.171
$\delta\bar{t}_{ZR}$	$\mu s$	0.031	0.439	0.198	2.611
$\bar{\lambda}_C/\bar{\ell}_{ZI}$		31.2	32.6	58.5	34.6
$\bar{\lambda}_C/\bar{\ell}_Z$		10.7	10.2	12.8	11.0

## 5.5 Discussion du modèle

La simulation numérique est aujourd'hui considérée comme le seul outil qui sera capable, lorsque les capacités de calcul le permettront, de coupler aux équations de la dynamique des fluides compressibles réactifs les équations d'état complexes, telles que les mécanismes détaillés de cinétique chimique, nécessaires pour décrire les phénomènes de dynamique de détonation, à la fois qualitativement et quantitativement. Ces phénomènes font essentiellement intervenir la compressibilité et la cinétique chimique, mais, selon le mélange, la diffusion turbulente peut également jouer un rôle. Cela nécessite encore d'importantes ressources de calcul, ce qui empêche toujours cet outil d'anticiper des situations réelles. Par conséquent, la largeur moyenne  $\bar{\lambda}_C$  des cellules formant la structure 3D des zones de réaction de détonation reste un indicateur de détonabilité utile au pré-dimensionnement des dispositifs.

Notre modèle prédictif d'une largeur représentative  $\bar{\lambda}_C$  de cellule de détonation met bien en œuvre un mécanisme détaillé de cinétique chimique mais utilise une description statistique plutôt que détaillée de la dynamique complexe des ondes transversales impliquées dans la structure cellulaire 3D des détonations. Son objectif est de prédire facilement une largeur moyenne physique suffisamment précise à des fins pratiques. Son postulat physique est que le front de détonation se propage dans des conditions telles que les processus de combustion cellulaire et ZND ont des taux de combustion moyens équivalents sur leurs temps de combustion respectifs. Comme le modèle ZND n'est une moyenne représentative de l'écoulement réel que si le nombre de cellules sur un front 3D est suffisamment élevé, il n'est donc valable que pour les détonations multicellulaires, et non pour les détonations marginales. Les détonations multicellulaires (CJ) présentent des vues de front aux facettes irrégulières. Les largeurs moyennes des cellules ne sont indépendantes de la forme de la section transversale que pour des pressions initiales suffisamment élevées et de grandes distances par rapport à l'allumage (section 4.1). Notre modèle suppose que le front est multicellulaire au sens des deux limites des temps longs et des grandes surfaces de section transversale.

L'ergodicité stationnaire de la dynamique des ondes transversales est donc une hypothèse fondamentale de notre travail. En effet, nous ne connaissons aucune expérience qui montre une distribution statistique de motifs cellulaires vus de face qualitativement différente d'une expérience à l'autre, soit des motifs qui seraient distribués différemment en forme et dimension, si le nombre de cellules est suffisamment élevé. En particulier, les analyses statistiques des nombreux enregistrements cellulaires effectuées jusqu'à présent n'auraient pas pu converger vers les mêmes  $\bar{\lambda}_C$  si ce n'était pas le cas. Cette description

statistique est indépendante du fait que le mécanisme cellulaire soit ou non adiabatique. Nous avons montré qu'un pavage d'hexagone est la limite statistique équivalente en temps et espace au front cellulaire réel à motifs irréguliers. La valeur constante  $\bar{y} = 0,385$  (5.4) de la fraction massique moyenne de gaz brûlés est la conséquence de cette hypothèse ergodique et de l'indépendance dans le temps de la relation Descartes-Euler-Poincaré, et de sa limite.

Une amélioration du modèle serait de considérer le front comme un pavage de Voronoï à motifs multiples, avec l'hypothèse que la dynamique des ondes transversales est un processus aléatoire de Poisson à la fois stationnaire et homogène. En effet, les points centraux des motifs représentant de face les cellules de détonation sont distribuées aléatoirement en raison de leur grande sensibilité aux conditions initiales. Le tableau 5.4 montre la distribution correspondante du nombre d'arêtes  $A$  des motifs obtenus explicitement par CALKA [189] mais reconnus implicitement par MILES et MAILLARDET [190]. On observe la prédominance des hexagones, puis des pentagones et des heptagones, environ 75%, ce qui soutient la représentativité de la limite hexagonale utilisée dans ce travail. Cela suggère également que, pour ce pavage à motifs multiples, la fraction massique moyenne brûlée, calculable à partir d'une règle barycentrique fondée sur les fractions moyennes individuelles de masse brûlée et la distribution des motifs, ne serait que légèrement différente de la valeur  $\bar{y} \approx 0,385$  (5.4) pour l'hexagone seul. Nous observons également que  $\approx 67\%$  des motifs ont au plus six arêtes.

TABLE 5.4 – Proportion des formes en fonction du nombre de côtés  $A$  pour un processus aléatoire de Poisson stationnaire et homogène [189, 190].

$A$	3	4	5	6	7	8	9	10
%	1.1	10.7	25.9	29.5	19.9	9	3	0.7

L'idée de départ de notre approche est que les processus de combustion ZND et cellulaire doivent avoir le même taux de production de masse brûlée, relativement à leurs temps représentatifs de combustion complète respectifs, pour expliquer que les valeurs de célérité de détonation calculées par le modèle ZND et celles mesurées dans des tubes suffisamment larges et longs puissent être les mêmes. Le mécanisme de combustion cellulaire utilisé ici pour exprimer cette idée est la compression adiabatique par choc suivie d'une zone de réaction très proche de ce choc, d'où le taux cellulaire  $2/\bar{t}_C$  et la relation (5.10). Cette description, fermée avec le modèle adiabatique ZND prédit bien  $\bar{\lambda}_C$  pour les mélanges à cellules pariétalement régulières à irrégulières  $H_2 : O_2$ ,  $H_2 : Air$ ,  $C_3H_8 : O_2$ ,  $C_3H_8 : Air$  et  $C_2H_4 : Air$  mais la surestime pour les mélanges  $CH_4 : O_2$ . En effet, le mécanisme de combustion de ces derniers mélanges inclut une participation de combustion par diffusion turbulente, ce qui produit des cellules très irrégulières. Cependant, toutes les détonations

dans les tubes de dimensions transversales suffisamment larges se propagent avec la vitesse CJ, indépendamment de la régularité des structures cellulaires, de sorte que l'idée de départ devrait pouvoir s'appliquer, en moyenne, à tout mécanisme de combustion cellulaire. Ainsi, une extension possible pourrait être de considérer la relation (5.10) toujours valide en moyenne et d'utiliser un modèle ZND non adiabatique pour étudier si l'approche pourrait aussi prédire les largeurs moyennes  $\bar{\lambda}_C$  des cellules très irrégulières, *i.e.* pour des zones de réaction cellulaire hautement instables. Toutefois, un bon accord éventuel ne pourrait pas être considéré comme un soutien de la représentativité d'une largeur moyenne issue de mesures à grande dispersion et donc de la suffisance de cette seule longueur caractéristique pour caractériser les propriétés géométriques des cellules fortement irrégulières, telles qu'observées sur les enregistrements longitudinaux. Indirectement, l'hypothèse adiabatique du modèle permet d'identifier les mélanges dont le processus cellulaire de combustion inclut une participation de la diffusion turbulente, lorsque l'écart de la prédiction à la mesure est trop grand alors que le mécanisme cinétique est adapté et le nombre de cellules suffisant.

En conclusion, si les mécanismes cinétiques chimiques sont adaptés aux mélanges considérés, un post-traitement simple et rapide des résultats de calcul ZND prédit des valeurs et des tendances correctes des largeurs moyennes  $\bar{\lambda}_C$  des cellules de détonation dont les enregistrements sur dépôt de carbone longitudinaux présentent des cellules indépendantes du confinement et classifiables de régulière à irrégulière.



# Conclusion

---

Cette thèse a été consacrée à la détonation dans des mélanges gazeux réactifs confinés. L'accent a été mis sur des aspects tridimensionnels de la zone de réaction cellulaire et de comportements dynamiques de la détonation. L'étude a consisté en la réalisation et l'analyse d'observations expérimentales en situations de propagation stationnaire ou instationnaire et du comportement en ré-amorçage derrière un obstacle. Elle a aussi abouti à un modèle prédictif d'une largeur représentative des cellules de détonation.

À ce jour, la structure cellulaire d'une détonation est caractérisée par une longueur caractéristique, essentiellement une largeur moyenne de cellule, et par la régularité de ces cellules, celle-ci étant appréciée qualitativement à partir d'enregistrements sur dépôt de carbone et quantitativement par un nombre sans dimension issu de l'analyse des profils de réaction de la détonation théorique plane. Les largeurs moyennes de cellule sont déterminées expérimentalement dans des conditions de laboratoire plutôt que proches de l'application. Elles sont définies comme la largeur moyenne des losanges dessinés, sur un dépôt de carbone en paroi du tube au cours de la propagation de la détonation, par l'interaction, avec la paroi du tube, des ondes transverses formant les bords des cellules. Les comportements dynamiques des détonations sont considérés être approximativement auto-semblables par rapport à la largeur moyenne des losanges pariétaux enregistrés en tube droits suffisamment larges. Les corrélations qui en résultent permettent d'anticiper ces comportements pour des configurations d'utilisation de la détonation différentes de celles du laboratoire. Cette largeur moyenne est donc une longueur fondamentale de la dynamique des détonations. Elle constitue une mesure de la détonabilité d'un pré-mélange : plus elle est petite, plus la détonation se propagera facilement en milieu confiné.

À l'aide d'enregistrements pariétaux et de face d'un front de détonation, nous avons étudié expérimentalement l'influence de la forme de la section d'un tube droit sur la structure cellulaire dans le cas de la propagation stationnaire de la détonation. Les formes étudiées étaient ronde, carrée ou triangulaire, et l'aire des sections était identique quelle que soit leur forme. Nous avons montré que les losanges pariétaux pouvaient ne pas seuls caractériser la structure cellulaire. En effet, les vues de face montrent toujours des motifs

très irréguliers en tubes de section ronde ou triangulaire, alors que, selon le mélange, les losanges pariétaux peuvent être réguliers quelles que soient la pression et la forme de la section, et que les motifs vus de face peuvent être réguliers aux plus basses pressions dans les tubes de section carrée. Plus précisément, pour les mélanges dits stables, définis par des losanges réguliers, les enregistrements frontaux aux plus basses pressions initiales  $p_0$ , *i.e.* avec un nombre limité de cellules, montrent des motifs réguliers en tube carré, fait par ailleurs bien connu pour ces mélanges, mais toujours irréguliers en tube rond ou triangulaire. La régularité frontale en tube carré disparaît avec l'augmentation de  $p_0$ . Cette variation conduit à l'émergence de domaines à motifs irréguliers répartis stochastiquement, domaines d'autant plus étendus que  $p_0$  est grand. Au dessus d'une certaine valeur de  $p_0$ , vraisemblablement dépendante du mélange et de l'aire des sections, les vues de face montrent que toute la section carrée est recouverte de motifs irréguliers et identiques à ceux en tubes rond et triangulaire, bien que, pour ces mélanges stables, les losanges pariétaux restent réguliers quelles que soient  $p_0$  et la forme de la section. L'influence de la section devient négligeable dès lors que le nombre de cellules sur le front est suffisamment grand, soit, dans nos conditions, à partir d'environ 100 cellules sur le front.

Nous sommes ainsi emmenés vers la notion de structure cellulaire auto-confinée pour des cellules en nombre suffisamment grand. Elle désigne les situations où la dynamique d'une cellule n'est déterminée que par son interaction avec ses voisines et de manière identique avec la paroi du tube. En d'autres termes, le temps caractéristique de renouvellement d'une cellule est très petit devant celui du parcours de la section du tube par une onde transverse. Notre modèle prédit bien les largeurs moyennes mesurées de ces cellules auto-confinées dès lors que le mécanisme de cinétique chimique peut physiquement représenter la combustion du mélange considéré et qu'une largeur moyenne a un sens physique. Ce n'est pas le cas pour les mélanges très instables, définis par des losanges très irréguliers.

Notre modèle considère effectivement un grand nombre de cellules, condition nécessaire à la précision de ses prédictions. Il repose sur le principe que le processus réel - cellulaire - et le processus théorique - ZND - doivent brûler la même masse de gaz frais à la même vitesse, pour une période suffisamment longue et une section de tube identique et suffisamment large, de manière à assurer que ces deux processus conduisent bien à la même célérité moyenne de propagation du front de détonation. Ces processus doivent donc avoir les mêmes taux de combustion moyen, chacun définis sur leurs temps de combustion respectifs. Nous avons donc considéré le mécanisme cellulaire de combustion était du type adiabatique. Dans ce cas, la combustion est amorcée par la seule onde de choc incidente résultant de la collision d'ondes transverses convergeant l'une vers l'autre. Puis elle se développe dans le domaine aval de ce choc et derrière les ondes transverses divergentes

---

résultant de la collision antérieure d'ondes transverses. Ce mécanisme par compression adiabatique est associé depuis longtemps à des cellules dont les losanges pariétaux ne sont pas trop irréguliers. Dans le cas contraire, il est bien établi que la combustion cellulaire n'est pas adiabatique puisqu'elle inclut une participation certaine de la diffusion turbulente en raison de l'advection de poches de gaz choqués mais non-brûlés. Pour le cas du mécanisme adiabatique, nous avons relevé que le temps caractéristique de combustion cellulaire devait, par symétrie, être égal à la moitié de celui nécessaire pour que le front moyen avance d'une demi-longueur de cellule. Les autres éléments de notre modèle sont la théorie des graphes, les probabilités géométriques et le modèle ZND de la détonation plane. Sa mise en oeuvre est un post-traitement quasi-instantané des profils ZND. Nous soulignons encore que les largeurs moyennes de losanges trop irréguliers ont des écart-types trop larges pour que ces moyennes aient du sens, et nous observons que la mesure de la régularité se fonde sur un nombre déterminé par calculs ZND adiabatiques.

Toujours à l'aide d'enregistrements pariétaux et de face d'un front de détonation, nous avons étudié expérimentalement comment la forme d'une section de tube uniformément croissante influençait la structure cellulaire et la dynamique de l'expansion instationnaire de la détonation à partir d'un tube droit de section constante et de même forme que le tronçon divergent. Nous avons choisi des lois d'augmentation de l'aire des sections assurant la même aire à la même abscisse quelle que soit la forme de la section. Au début de la diffraction, les enregistrements frontaux montrent que le nombre de cellules reste essentiellement constant et donc que leur largeur augmente. Également, la dynamique cellulaire initiale est conservée, *i.e.* pour le tronçon divergent carré et des pressions initiales suffisamment basses, des motifs réguliers le restent en début de la diffraction. Nous avons attribué cet effet à l'expansion latérale de l'écoulement induite par la diffraction. Elle ralentit le processus de décomposition chimique par refroidissement adiabatique, ce qui augmente les temps et longueurs chimiques caractéristiques et, donc, la largeur des cellules initiales, mais sans en changer leur nombre. À mesure de l'avancée de l'onde, l'importance relative de l'expansion latérale diminue, le nombre de cellule augmente et des domaines irréguliers apparaissent jusqu'à recouvrir toute la surface du front. Nous obtenons donc avec une augmentation d'aire au cours d'une même expérience les mêmes tendances qualitatives qu'avec une augmentation de pression initiale d'une expérience à une autre dans un même tube de section constante, c'est-à-dire que l'irrégularité des facettes sur les enregistrements frontaux augmentent avec leur nombre. En cours et en fin de diffraction, nous avons cependant observé que la largeur moyenne de cellule, devenue indépendante de la géométrie à mesure de l'avancée du front, est supérieure à la valeur en tube rond de plus grande section constante alors même que, pour cette pression initiale, l'effet de géométrie y est négligeable, comparativement aux mesures dans les tubes de section plus



petites. Il est difficile d'attribuer cette différence à un effet persistant, mais indétectable, de l'expansion instationnaire dans le tronçon divergent ou de la section dans le tube droit sur la dynamique locale de la propagation stationnaire. Les cellules seraient ainsi trop larges dans le premier cas et pas assez dans le second.

Notre interprétation de l'irrégularité intrinsèque de motifs frontaux suffisamment nombreux est que le temps caractéristique de battement cellulaire est très petit devant celui du parcours de la section du tube par une onde transverse. Ainsi, les fluctuations locales de la dynamique de l'écoulement à l'échelle du temps de battement cellulaire dominent la dynamique forcée que pourrait imposer aux ondes transverses une section carrée ou rectangulaire du tube, selon le mélange et sa pression initiale. Les perturbations locales agissent plus vite que la dynamique globale, et une structure cellulaire à grand nombre de cellules impose donc le tracé pariétal de la dynamique de ses ondes transverses, alors qu'aux nombres trop faibles, c'est la géométrie du tube, en particulier sa dimension transversale, qui impose sa dynamique aux ondes transverses et donc le tracé pariétal. Cela donne une explication alternative de la régularité des motifs observés dans le cas opposé des mélanges stables en tube carré aux faibles nombres de cellules. Cela explique également la bonne coïncidence des largeurs prédites par notre modèle. En effet, d'une part, ce modèle est construit sur la limite explicite d'un grand nombre de cellules et, d'autre part, ses prédictions sont bonnes pour des sélections de largeurs mesurées de cellules suffisamment petites par rapport aux dimensions transverses des tubes.

La diffraction à travers un orifice d'une détonation multicellulaire initialement Chapman-Jouguet montre un exemple de l'influence des formes de section sur les phénomènes transitoires en dynamique des détonations. Nous avons réalisé des enregistrements sur dépôt de carbone et par visualisations ultra-rapides de la chimiluminescence et par ombroscopie des mécanismes de ré-amorçage après le découplage des fronts de combustion et de choc induit par la diffraction. Nous avons distingué six mécanismes de ré-amorçage dans le tube de section carré et quatre dans le tube de section ronde. Globalement, la détonation se réinstalle plus facilement après diffraction dans le tube carré, que le paramètre varié soit la pression initiale (la largeur de cellule avant diffraction) ou le rapport d'ouverture de l'orifice. En particulier, ces effets de la forme de la section ne sont pas seulement des modifications transitoires de la propagation simple de la détonation. Ils sont en effet observés au delà de l'intervalle de pression initiale  $p_0$  où, en situation de propagation simple, la forme de la section du tube n'a plus d'influence sur la largeur moyenne des cellules. Pour notre part, nous pensons que ces observations pour ce phénomène transitoire doivent être rapprochées de celles pour le phénomène d'expansion en tube faiblement divergent. Elles se résument à une très grande sensibilité des longueurs et temps chimiques caractéristiques aux variations

---

de l'état thermodynamique du fluide induites par les variations d'expansions longitudinales et transversales, à un long temps de relaxation des comportements instationnaires vers la détonation multi-cellulaire Chapman-Jouguet en moyenne, et à la nécessité de grandes dimensions transverses des tubes à détonation. Ce constat est important pour les systèmes utilisant la détonation qui, par destination, peuvent nécessiter des formes complexes et des dimensions mesurées.

Les dynamiques locales et globales des détonations, en configurations académiques ou appliquées, sont donc intrinsèquement tridimensionnelles. Il est difficile d'anticiper les hypothèses suffisantes de leurs interprétations selon la composition du mélange, ses conditions initiales de pression et de température ou la géométrie de son confinement. Ainsi, la plus simple des configurations de laboratoire est le phénomène de détonation cellulaire en propagation stationnaire dans un tube droit. Si la compréhension et la modélisation de ses détails sont nécessaires, son importance doit être relativisée au vu de ses très grands écarts aux comportements observés dans les situations pratiques. Par exemple, les amorçages accidentels ou les propagations en géométrie complexes montrent la coexistence de domaines déflagrants et détonants. Pour notre part, si l'on considère que la cellule d'une telle détonation est un élément physique important, nous avons cherché à contribuer à sa caractérisation et proposé un modèle simple permettant d'en prédire fiablement les dimensions dans leurs limites physiques de représentativité.

De manière générale, dans les gaz, peu de situations pratiques semblent pouvoir être décrites par des simulations ou des modélisations fondées sur les équations d'Euler pour le fluide compressible réactif en évolution adiabatique. Il faut donc espérer que l'augmentation des capacités de calcul permettra un jour des prédictions numériques à partir des équations de Navier-Stokes. En l'état des moyens actuels, nous soulignons qu'il ne faut pas confondre restitution et prédiction et que le coût d'étapes de conception validées numériquement en termes de rapidité de production de démonstrateurs reste très élevé. Nous sommes ainsi emmené à penser que les démonstrateurs impliquant des phénomènes de déflagration et de détonation devraient être directement conçus à un niveau suffisant de maturité technologique.



# Contributions scientifiques

---

## Articles

1. V. RODRIGUEZ, J. MELGUIZO-GAVILANES, V. MONNIER, P. VIDAL, R. ZITOUN (2023) "Steady rotation of a Mach shock : experimental and numerical evidences", *Experiments in Fluids* 64, DOI : [10.1007/s00348-023-03612-z](https://doi.org/10.1007/s00348-023-03612-z)
2. V. MONNIER, P. VIDAL, V. RODRIGUEZ, R. ZITOUN (2023) "From graph and geometric probabilities to a representative cell width for three-dimensional detonation cells", *Combustion & Flame* (en révision), [version provisoire sur HAL](#)
3. V. MONNIER, V. RODRIGUEZ, P. VIDAL, R. ZITOUN (2022) "An analysis of three-dimensional patterns of experimental detonation cells", *Combustion & Flame* 245, 11310 DOI : [10.1016/j.combustflame.2022.112310](https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2022.112310)
4. V. RODRIGUEZ, V. MONNIER, P. VIDAL, R. ZITOUN (2022) "Non-dimensionalized distances and limits for the transition of deflagration to detonation", *Shock Waves* 32, DOI : [10.1007/s00193-022-01088-0](https://doi.org/10.1007/s00193-022-01088-0)

## Conférences

5. V. MONNIER, P. VIDAL, V. RODRIGUEZ, R. ZITOUN (2023) "Graph theory, geometric probabilities, and a representative width for three-dimensional detonation cells", *29<sup>th</sup> International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems (ICDERS, Séoul)*
6. V. MONNIER, V. RODRIGUEZ, P. VIDAL, R. ZITOUN (2023) "Three-dimensional dynamics of detonation diffraction : effects of the tube cross-section shape", *29<sup>th</sup> ICDERS (Séoul)*
7. V. MONNIER, V. RODRIGUEZ, P. VIDAL, R. ZITOUN (2023) "Can statistics benefit detonation dynamics? Cell widths from graph theory and geometric probabilities", *European Combustion Meeting (ECM), Specialist Workshop, (Rouen)*
8. V. MONNIER, V. RODRIGUEZ, P. VIDAL, R. ZITOUN (2023) "Aspects tridimensionnels de la détonation cellulaire : des expériences et un modèle", *Journée Des Doctorants François Lacas*

9. V. MONNIER, V. RODRIGUEZ, P. VIDAL, R. ZITOUN (2023) "Aspects tridimensionnels de la détonation cellulaire : des expériences et un modèle", *Journée Des Doctorants de l'Institut P'*
10. V. MONNIER, V. RODRIGUEZ, P. VIDAL, R. ZITOUN (2023) "Three-dimensional dynamics of gaseous detonations : experimental observations and modelling of the local cellular structure, and large-scale transients", *Young Researcher's Forum on Detonation* - [Disponible sur Youtube](#)
11. V. MONNIER, V. RODRIGUEZ, P. VIDAL, R. ZITOUN (2022) "Experimental analysis of cellular detonations : a discussion on regularity and three-dimensional patterns", *28<sup>th</sup> ICDERS* (Naples)

### Autres

12. V. MONNIER, V. RODRIGUEZ, P. VIDAL, R. ZITOUN (2023) "Tête-à-tête avec une détonation", Image proposée au concours *La preuve par l'image* du CNRS et de l'Acfas (Québec), ([Annexe B](#))

### Posters

13. V. MONNIER, V. RODRIGUEZ, P. VIDAL, R. ZITOUN (2023) "Three-dimensional detonation cells and transient dynamics : experimental results and a predictive model", *ECM*
14. V. MONNIER, V. RODRIGUEZ, P. VIDAL, R. ZITOUN (2022) "An analysis of three-dimensional patterns of experimental detonation cells", *Journée Des Doctorants de l'Institut P'*

# Concours La preuve par l'image 2023

---

L'image ci-dessous a été proposée sous le titre "Tête-à-tête avec une détonation" dans le cadre de la 5<sup>ème</sup> édition du concours *La preuve par l'image* organisé par le CNRS et l'Acfas au Québec.

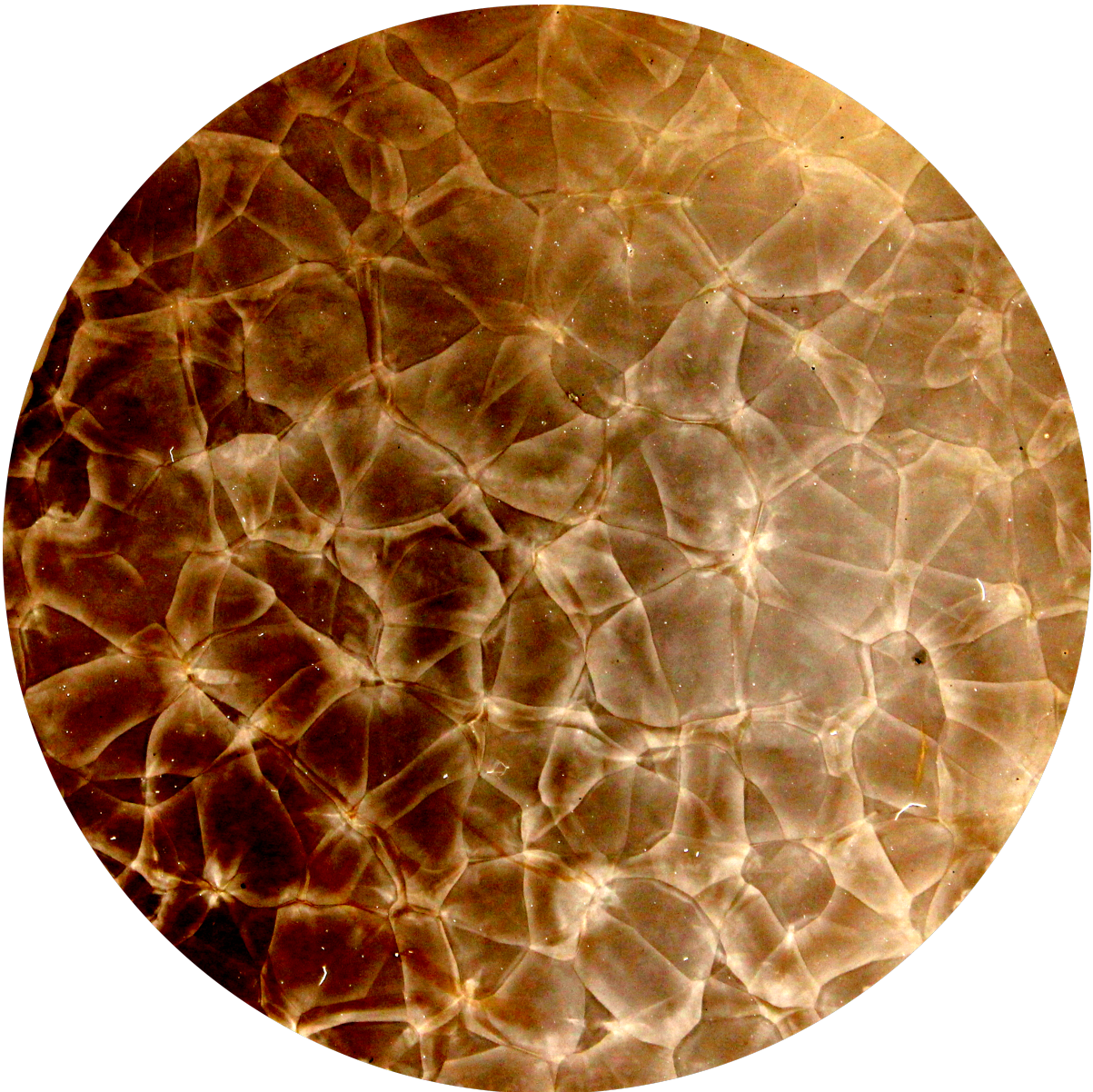


FIGURE B.1 – Tête-à-tête avec une détonation

## Description

Les fronts de détonations dans les gaz ont une structure cellulaire liée à l'instabilité intrinsèque de leur zone de réaction. L'image obtenue à l'Institut P' est un instantané des ondes transverses délimitant les cellules. Un modèle considérant leur mouvement stationnaire ergodique a été élaboré et prédit la taille moyenne des cellules. Cette caractérisation relève un défi expérimental et numérique lié aux célérités très élevées des détonations, quelques km/s, et d'une très grande sensibilité paramétrique des simulations. La taille des cellules conditionne l'existence et la propagation des détonations. Les applications incluent la sécurité des procédés, comme ceux relatifs à la transition vers l'hydrogène, la propulsion avancée par gain de pression de type détonation et la compréhension et la modélisation d'explosions astrophysiques comme les supernovæ Ia.

## Technique de prise de vue

L'image est une photographie d'un enregistrement expérimental obtenu par impact du front de détonation sur une plaque recouverte d'un dépôt de très fines particules de carbone qui donnent sa couleur à l'image. Le contraste a été légèrement accentué par numérisation.

## Crédits de l'image

MONNIER VIANNEY, RODRIGUEZ VINCENT, VIDAL PIERRE, ZITOUN RATIBA, CNRS, ENSMA, Université de Poitiers

## Date de prise de vue

30/09/2022







# Bibliographie

- [1] C. LEIBER et R. M. DOHERTY, « Review on explosion events - a comparison of military and civil experiences, » *Prevention of Hazardous Fires and Explosions*, V. E. ZARKO, V. WEISER, N. EISENREICH et A. A. VASIL'EV, éd., 1999, p. 1-16. DOI : [10.1007/978-94-011-4712-5\\_1](https://doi.org/10.1007/978-94-011-4712-5_1).
- [2] N. MANSON, « Historique de la découverte de l'onde de détonation, » *Journal de Physique Colloques*, n° 48, p. C4-7-C4-37, 1987. DOI : [10.1051/jphyscol:1987401](https://doi.org/10.1051/jphyscol:1987401).
- [3] N. MANSON et E. DABORA, « Chronology of Research on Detonation Waves : 1920-1950, » *Progress in Astronautics and Aeronautics*, p. 1849-185, 2005, ISSN : 1540-7489. DOI : [10.2514/5.9781600866265.0003.0039](https://doi.org/10.2514/5.9781600866265.0003.0039).
- [4] F. A. ABEL, « Contributions to the history of explosive agents, » *Journal of the Franklin Institute*, t. 88, p. 52-55, 1869. DOI : [10.1016/S0016-0032\(69\)90235-X](https://doi.org/10.1016/S0016-0032(69)90235-X).
- [5] S. J. von ROMOCKI, « Geschichte der Explosivstoffe. » R. Oppenheim (Gustav Schmidt), 1865.
- [6] L. P. ROUX et E. SARRAU, « Expériences sur les effets de la dynamite, » *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences*, t. 76, p. 1089-1092, 1873.
- [7] H. de la GOUPILLIÈRE, « Rapport présenté au nom de la commission d'études des moyens propres à prévenir les explosions du grisou, » *Annales des Mines*, t. 18, p. 193-415, 1880.
- [8] H. DAVY, « I. On the fire-damp of coal mines, and on methods of lighting the mines so as to prevent its explosion, » *Philosophical Transaction of the Royal Society A*, t. 106, p. 1-22, 1816. DOI : [10.1098/rstl.1816.0001](https://doi.org/10.1098/rstl.1816.0001).
- [9] J. M. THOMAS, « Sir Humphry Davy and the coal miners of the world : a commentary on Davy (1816) 'An account of an invention for giving light in explosive mixtures of fire-damp in coal mines', » *Philosophical Transaction of the Royal Society A*, t. 373, 2015. DOI : [10.1098/rsta.2014.0288](https://doi.org/10.1098/rsta.2014.0288).
- [10] « Journal officiel de la République française du 27 Mars 1877, » *JORF*, n° 0085, p. 2166, 1877.
- [11] F.-E. MALLARD et H. LE CHATELIER, « Sur les vitesses de propagation de l'inflammation dans les mélanges gazeux explosifs, » *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences*, t. 93, p. 145-148, 1881.
- [12] M. BERTHELOT, « Sur les vitesses de propagation des phénomènes explosifs dans les gaz, » *Comptes-Rendus de l'Académie des Sciences*, t. 93, p. 12-22, 1881.

- [13] M. B. P. VIEILLE, « L'Onde Explosive, » *Annales de Chimie et de Physique*, t. 28, 5 1883.
- [14] P. WOLAŃSKI, « Detonative propulsion, » *Proceedings of the Combustion Institute*, t. 34, n° 1, p. 125-158, 2013, ISSN : 1540-7489. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.proci.2012.10.005>.
- [15] J.-C. CABROL, « Formage par explosif, » *Techniques de l'ingénieur*, 1989. DOI : [10.51257/a-v1-b7585](https://doi.org/10.51257/a-v1-b7585).
- [16] M. HAGHGOO, H. BABAEI et T. M. MOSTOFI, « Dynamic response of thin triangular plates under gaseous detonation loading, » *Materials Today Communications*, t. 31, p. 103 423, 2022, ISSN : 2352-4928. DOI : [10.1016/j.mtcomm.2022.103423](https://doi.org/10.1016/j.mtcomm.2022.103423).
- [17] T. VEYRENC et O. HOUVENAGEL, « Futurs énergétiques 2050 - Principaux résultats, » Réseau de Transport d'Électricité (RTE), rapp. tech., 2021.
- [18] F. E. HASKIN, A. L. CAMP, S. A. HODGE et D. A. POWERS, « Perspectives on reactor safety, » U.S. Nuclear Regulatory Commission, rapp. tech. NUREG/CR-6042, Rev.2 SAND 93-0971, 2001.
- [19] D. W. STAMPS, W. B. BENEDICK et S. R. TIESZEN, « Hydrogen-Air-Diluent Detonation Study for Nuclear Reactor Safety Analyses, » n° NUREG/CR-5525 SAND89-2398, 1991.
- [20] R. K. KUMAR et W. A. DEWIT, « Detonation Cell Widths in Hydrogen/Oxygen/Diluent Mixtures at Low Initial Pressures, » *J. Energy Resour. Technol.*, t. 117, n° 1, p. 13-17, 1995. DOI : [10.1115/1.2835313](https://doi.org/10.1115/1.2835313).
- [21] P. CLAVIN et G. SEARBY, *Combustion Waves and Fronts in Flows : Flames, Shocks, Detonations, Ablation Fronts and Explosion of Stars*. Cambridge University Press, 2016. DOI : [10.1017/CB09781316162453](https://doi.org/10.1017/CB09781316162453).
- [22] A. HIGGINS, « Steady One-Dimensional Detonations, » *Shock Waves Science and Technology Library, Vol. 6*, F. ZHANG, éd., Springer, Berlin, Heidelberg, 2012, p. 33-105. DOI : [10.1007/978-3-642-22967-1\\_2](https://doi.org/10.1007/978-3-642-22967-1_2).
- [23] H. D. NG, « Detonation Instability, » *Shock Waves Science and Technology Library, Vol. 6*, F. ZHANG, éd., Springer, Berlin, Heidelberg, 2012, p. 107-212. DOI : [10.1007/978-3-642-22967-1\\_3](https://doi.org/10.1007/978-3-642-22967-1_3).
- [24] A. A. VASIL'EV, « Dynamic Parameters of Detonation, » *Shock Waves Science and Technology Library, Vol. 6*, F. ZHANG, éd., Springer, Berlin, Heidelberg, 2012, p. 213-279. DOI : [10.1007/978-3-642-22967-1\\_4](https://doi.org/10.1007/978-3-642-22967-1_4).

- [25] D. DESBORDES et H.-N. PRESLES, « Multi-Scaled Cellular Detonation, » *Shock Waves Science and Technology Library, Vol. 6*, F. ZHANG, éd., Springer, Berlin, Heidelberg, 2012, p. 281-338. DOI : [10.1007/978-3-642-22967-1\\_5](https://doi.org/10.1007/978-3-642-22967-1_5).
- [26] F. A. BYKOVSKII, « Continuous spin detonations, » *J. Propuls. Power*, t. 22, p. 1204-1216, 6 2006. DOI : [10.2514/1.17656](https://doi.org/10.2514/1.17656).
- [27] J. E. SHEPHERD et J. KASAHARA, « Analytical Models for the Thrust of a Rotating Detonation Engine, » Explosion Dynamics Laboratory, California Institute of Technology Report, rapp. tech. FM2017.001, 2017. DOI : [10.7907/DNVT-PY80](https://doi.org/10.7907/DNVT-PY80).
- [28] P. WOLANSKI, *Research on detonative propulsion*. Lukasiewicz Research Network - Institute of Aviation, ISBN : 978-83-63539-45-0, 2021.
- [29] I. O. MOEN, G. O. THOMAS, D. BJERKETVEDT et P. A. THIBAUT, « Influence of Cellular Regularity on the Behavior of Gaseous Detonations, » *Dynamics of Explosions*, t. 104, Progress in Astronautics et Aeronautics, 1986, chap. III. Detonation Structure and Limit Propagation, p. 220-243. DOI : [10.2514/5.9781600865800.0220.0243](https://doi.org/10.2514/5.9781600865800.0220.0243).
- [30] R. SOLOUKHIN, « Nonstationary phenomena in gaseous detonation, » *Symp. (Int.) Combust.*, t. 12, n° 1, p. 799-807, 1969, ISSN : 0082-0784. DOI : [10.1016/S0082-0784\(69\)80461-3](https://doi.org/10.1016/S0082-0784(69)80461-3).
- [31] J. H. S. LEE et M. I. RADULESCU, « On the Hydrodynamic Thickness of Cellular Detonations, » *Combustion, Explosion and Shock Waves*, t. 41, n° 6, p. 745-765, 2005, ISSN : 1573-8345. DOI : [10.1007/s10573-005-0084-1](https://doi.org/10.1007/s10573-005-0084-1).
- [32] M. I. RADULESCU, G. J. SHARPE, C. K. LAW et J. H. S. LEE, « The hydrodynamic structure of unstable cellular detonations, » *Journal of Fluid Mechanics*, t. 580, p. 31-81, 2007. DOI : [10.1017/S0022112007005046](https://doi.org/10.1017/S0022112007005046).
- [33] W. J. RANKINE, « On the thermodynamic theory to finite longitudinal disturbance, » *Philosophical Transactions*, t. 160, p. 277-288, 1870.
- [34] H. HUGONIOT, « Propagation des mouvements dans les corps et spécialement dans les gaz parfaits, » *Journal de l'École Polytechnique*, t. 57, 1887.
- [35] V. A. MICHELSON, « On the normal ignition velocity of explosive gaseous mixtures, » *Moscow Imperial University on Mathematics and Physics*, t. 10, p. 1-90, 1893.
- [36] P. VIEILLE, « Rôle des discontinuités dans la propagation des phénomènes explosifs, » *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences*, p. 413-416, 1900.
- [37] J. C. CRUSSARD, « Sur les quelques propriétés de l'onde explosive, » *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences*, t. 144, p. 417-420, 1907.

- [38] D. L. CHAPMAN, « On the rate of explosion in gases, » *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, t. 47, n° 284, p. 90-104, 1899. DOI : [10.1080/14786449908621243](https://doi.org/10.1080/14786449908621243).
- [39] E. JOUGUET, « Sur la propagation des réactions chimiques dans les gaz, » *Journal de Mathématiques Pures et Appliquées*, t. 1, p. 347-425, 1905.
- [40] Y. B. ZEL'DOVICH, « Teoria pazprostranenia Detonazii b gasovikh smessei, » *Zhurnal Eksperimental'noi i Teoreticheskoi Fiziki*, t. 10, 1940.
- [41] G. I. TAYLOR, « The dynamics of the combustion products behind plane and spherical detonation fronts in explosives, » *Proceedings of the Royal Society A*, t. 200, p. 235-247, 1950.
- [42] Y. B. ZEL'DOVICH, « Pressure and velocity distributions in the detonation products of a divergent spherical wave, » *Zh. Eksp. Teor. Fiz*, t. 12, p. 389-406, 1942.
- [43] Y. N. DENISOV et Y. K. TROSHIN, « Pulsating and Spinning Detonation of Gaseous Mixtures in Tubes, » *Dokl. Akad. Nauk SSSR*, t. 125, p. 110-113, 1959.
- [44] G. ABOUSEIF et T. TOONG, « Theory of unstable one-dimensional detonations, » *Combustion and Flame*, t. 45, p. 67-94, 1982, ISSN : 0010-2180. DOI : [10.1016/0010-2180\(82\)90034-7](https://doi.org/10.1016/0010-2180(82)90034-7).
- [45] V. GAMEZO, D. DESBORDES et E. ORAN, « Two-dimensional reactive flow dynamics in cellular detonation waves, » *Shock Waves*, t. 9, p. 11-17, 1999. DOI : [10.1007/s001930050134](https://doi.org/10.1007/s001930050134).
- [46] V. N. GAMEZO, D. DESBORDES et E. S. ORAN, « Formation and evolution of two-dimensional cellular detonations, » *Combustion and Flame*, t. 116, n° 1, p. 154-165, 1999, ISSN : 0010-2180. DOI : [10.1016/S0010-2180\(98\)00031-5](https://doi.org/10.1016/S0010-2180(98)00031-5).
- [47] P. CLAVIN et B. DENET, « Decay of plane detonation waves to the self-propagating Chapman–Jouguet regime, » *Journal of Fluid Mechanics*, t. 845, p. 170-202, 2018.
- [48] L. D. LANDAU et M. LIFSHITZ, *Fluid mechanics*. Oxford (1958) : Pergamon, 1944, chap. IX.
- [49] P. D. LAX, « Hyperbolic systems of conservation laws II, » *Communications on Pure and Applied Mathematics*, t. 10, n° 4, p. 537-566, 1957. DOI : [10.1002/cpa.3160100406](https://doi.org/10.1002/cpa.3160100406).
- [50] G. R. FOWLES, « Subsonic-supersonic condition for shocks, » *Physics of Fluids*, t. 18, p. 776-780, 1975. DOI : [10.1063/1.861238](https://doi.org/10.1063/1.861238).

- [51] G. B. WHITHAM, « A new approach to problems of shock dynamics Part I Two-dimensional problems, » *Journal of Fluid Mechanics*, t. 2, n° 2, p. 145-171, 1957. DOI : [10.1017/S002211205700004X](https://doi.org/10.1017/S002211205700004X).
- [52] G. B. WHITHAM, « A new approach to problems of shock dynamics Part 2. Three-dimensional problems, » *Journal of Fluid Mechanics*, t. 5, n° 3, p. 369-386, 1959. DOI : [10.1017/S002211205900026X](https://doi.org/10.1017/S002211205900026X).
- [53] « Shock Dynamics, » *Linear and Nonlinear Waves*. John Wiley & Sons, Ltd, 1974, chap. 8, p. 263-311, ISBN : 9781118032954. DOI : [10.1002/9781118032954.ch8](https://doi.org/10.1002/9781118032954.ch8).
- [54] J. RIDOUX, « Contribution au développement d'une méthode de calcul rapide de propagation des ondes de souffle en présence d'obstacles, » thèse de doct., Université Paris 6, 2017.
- [55] R. F. CHISNELL, « The motion of a shock wave in a channel, with applications to cylindrical and spherical shock waves, » *Journal of Fluid Mechanics*, t. 2, n° 3, p. 286-298, 1957. DOI : [10.1017/S0022112057000130](https://doi.org/10.1017/S0022112057000130).
- [56] *NIST-JANAF Thermochemical Tables*, 1998. DOI : [10.18434/T42S31](https://doi.org/10.18434/T42S31).
- [57] P. VIDAL et R. ZITOUN, « A Velocity-Entropy Invariance theorem for the Chapman-Jouguet detonation, » *arXiv : Fluid Dynamics*, 2020.
- [58] Y. DENISOV et Y. TROSHIN, « Structure of gaseous detonation in tubes, » *Soviet Physics Technical Physics*, t. 5, n° 4, p. 419-431, 1960.
- [59] Y. DENISOV et Y. TROSHIN, « On the mechanism of detonative combustion, » *Symposium (International) on Combustion*, t. 8, n° 1, p. 600-610, 1961, Eighth Symposium (International) on Combustion, ISSN : 0082-0784. DOI : [10.1016/S0082-0784\(06\)80551-5](https://doi.org/10.1016/S0082-0784(06)80551-5).
- [60] C. CAMPBELL et D. W. WOODHEAD, « The ignition of gases by an explosion-wave. Part I. Carbon monoxide and hydrogen mixtures, » *Journal of the Chemical Society*, t. 129, p. 3010-3021, 1926.
- [61] W. A. BONE et R. P. FRASER, « A photographic investigation of flame movements in Carbonic Oxide-Oxygen Explosions, » *Philosophical Transaction of the Royal Society A*, t. 228, p. 197-234, 1929. DOI : [10.1098/rsta.1929.0005](https://doi.org/10.1098/rsta.1929.0005).
- [62] K. I. SHCHELKIN, « On a theory of the phenomenon of spin detonation, » *Doklady of the Academy of Sciences*, t. 47, p. 482-484, 1945.
- [63] J. B. ZEL'DOVICH, « On the theory of detonation spin, » *Doklady Academic of Sciences*, t. 52, p. 147-150, 1946.

- [64] N. MANSON, « Sur la structure des ondes explosives hélicoïdales, » *Comptes rendus de l'Académie des Sciences*, t. 222, p. 46-48, 1945.
- [65] G. I. TAYLOR et R. S. TANKIN, « Gasdynamics aspects of detonations, Fundamentals of Gasdynamics. » 1958.
- [66] J. FAY, « Mechanical theory of spinning detonations, » *Journal of chemical physics*, t. 20, p. 942-950, 1952. DOI : [10.1063/1.1700655](https://doi.org/10.1063/1.1700655).
- [67] J. H. S. LEE, « Unstable Detonations : Experimental Observations, » *The Detonation Phenomenon*. Cambridge University Press, 2008, chap. 6, p. 147-203. DOI : <https://doi.org/10.1017/CB09780511754708.007>.
- [68] R. A. STREHLOW et A. J. CROOKER, « The structure of marginal detonation waves, » *Acta Astronautica*, t. 1, p. 303-315, 1974.
- [69] H. O. BARTHEL, « Reaction Zone-Shock Front Coupling in Detonations, » *The Physics of Fluids*, t. 15, n° 1, p. 43-50, 1972. DOI : [10.1063/1.1693753](https://doi.org/10.1063/1.1693753).
- [70] F. PINTGEN, C. ECKETT, J. AUSTIN et J. SHEPHERD, « Direct observations of reaction zone structure in propagating detonations, » *Combustion and Flame*, t. 133, n° 3, p. 211-229, 2003, ISSN : 0010-2180. DOI : [10.1016/S0010-2180\(02\)00458-3](https://doi.org/10.1016/S0010-2180(02)00458-3).
- [71] F. P. PINTGEN et J. E. SHEPHERD, « Simultaneous Soot Foil and PLIF Imaging of Propagating Detonations, » *Proc. 19<sup>th</sup> ICDERS, Paper 119*, 2003.
- [72] J. AUSTIN, F. PINTGEN et J. SHEPHERD, « Reaction zones in highly unstable detonations, » *Proceedings of the Combustion Institute*, t. 30, n° 2, p. 1849-1857, 2005, ISSN : 1540-7489. DOI : [10.1016/j.proci.2004.08.157](https://doi.org/10.1016/j.proci.2004.08.157).
- [73] J. SHEPHERD, I. MOEN, S. MURRAY et P. THIBAUT, « Analyses of the cellular structure of detonations, » *Symposium (International) on Combustion*, t. 21, n° 1, p. 1649-1658, 1988, Twenty-First Symposium (International on Combustion), ISSN : 0082-0784. DOI : [10.1016/S0082-0784\(88\)80398-9](https://doi.org/10.1016/S0082-0784(88)80398-9).
- [74] K. TAKAI R.and Yoneda et T. HIKITA, « Study of Detonation Wave Structure, » *Symposium (Int) of Combustion*, t. 15, 1 1975.
- [75] M. DORMAL, J.-C. LIBOUTON et P. V. TIGGELEN, « Evolution of induction time in detonation cells††This paper was presented at the 6th International Colloquium on Gasdynamics of Explosions and Reactive Systems, 22–26 August 1977, Stockholm, Sweden., » *Gasdynamics of Explosions and Reactive Systems*, A. OPPENHEIM, éd., Pergamon, 1980, p. 875-884, ISBN : 978-0-08-025442-5. DOI : [10.1016/B978-0-08-025442-5.50053-6](https://doi.org/10.1016/B978-0-08-025442-5.50053-6).
- [76] R. A. STREHLOW, « Reactive Gas Mach Stems, » *Physics of Fluids*, t. 7, p. 908-910, 1964. DOI : [10.1063/1.1711305](https://doi.org/10.1063/1.1711305).

- [77] A. A. VASIL'EV, « Cell Size as the Main Geometric Parameter of a Multifront Detonation Wave, » *J. of Propulsion and Power*, t. 22, 6 2006.
- [78] M. KANESHIGE et J. SHEPHERD, *Detonation Database*, California Institute of Technology; Online available; accessed march 2022, 2002.
- [79] Y. AUFFRET, D. DESBORDES et H. PRESLES, « Detonation structure of  $C_2H_4 - O_2 - Ar$  mixtures at elevated initial temperature, » *Shock Waves*, t. 9, p. 107-111, avr. 1999. DOI : [10.1007/s001930050145](https://doi.org/10.1007/s001930050145).
- [80] Y. AUFFRET, D. DESBORDES et H. PRESLES, « Detonation structure and detonability of  $C_2H_2 - O_2$  mixtures at elevated initial temperature, » *Shock Waves*, t. 11, p. 89-96, 2001. DOI : [10.1007/PL00004069](https://doi.org/10.1007/PL00004069).
- [81] G. CICCARELLI, T. G. GINSBERG et J. L. BOCCIO, « The Influence of Initial Temperature on the Detonability Characteristics of Hydrogen-Air-Steam Mixtures, » *Combust. Sci. Technol.*, t. 128, n° 1-6, p. 181-196, 1997. DOI : [10.1080/00102209708935708](https://doi.org/10.1080/00102209708935708).
- [82] J. SHEPHERD, « Chemical kinetics of Hydrogen-Air-Diluent Detonations, » *Dynamics of Explosions*, J.-C. LEYER, R. SOLOUKHIN et J. BOWEN, éd., t. 106, Progress in Astronautics et Aeronautics Series, 1986, p. 263-293. DOI : [10.2514/5.9781600865800.0263.0293](https://doi.org/10.2514/5.9781600865800.0263.0293).
- [83] H. N. PRESLES, D. DESBORDES, M. GUIRARD et C. GUERRAUD, « Gaseous nitromethane and nitromethane-oxygen mixtures : A new detonation structure, » *Shock Waves*, t. 6, n° 2, p. 111-114, juill. 1996. DOI : [10.1007/BF02515194](https://doi.org/10.1007/BF02515194).
- [84] F. JOUBERT, D. DESBORDES et H.-N. PRESLES, « Structure cellulaire de la détonation des mélanges  $H_2-NO_2/N_2O_4$ , » *Comptes Rendus Mécanique*, t. 331, n° 5, p. 365-372, 2003, ISSN : 1631-0721. DOI : [10.1016/S1631-0721\(03\)00075-5](https://doi.org/10.1016/S1631-0721(03)00075-5).
- [85] F. JOUBERT, D. DESBORDES et H. N. PRESLES, « Detonation cellular structure in  $NO_2/N_2O_4$ -fuel gaseous mixtures, » *Combustion and Flame*, t. 152, p. 482-495, 2008.
- [86] V. I. MANZHALEI, V. V. MITROFANOV et V. A. SUBBOTIN, « Measurement of inhomogeneities of a detonation front in gas mixtures at elevated pressures, » *Combustion, Explosion and Shock Waves*, t. 10, p. 89-95, 1974. DOI : [10.1007/BF01463793](https://doi.org/10.1007/BF01463793).
- [87] P. V. TIGGELEN et J. LIBOUTON, « Évolution des variables chimiques et physiques à l'intérieur d'une maille de détonation, » *Annales de Physique Fr.*, t. 14, p. 649-660, 6 1989. DOI : [10.1051/anphys:01989001406064900](https://doi.org/10.1051/anphys:01989001406064900).



- [88] G. J. SHARPE et J. J. QUIRK, « Nonlinear cellular dynamics of the idealized detonation model : Regular cells, » *Combustion Theory and Modelling*, t. 12, n° 1, p. 1-21, 2008. DOI : [10.1080/13647830701335749](https://doi.org/10.1080/13647830701335749).
- [89] H. ZHAO, J. H. LEE, J. LEE et Y. ZHANG, « Quantitative comparison of cellular patterns of stable and unstable mixtures, » *Shock Waves*, t. 26, n° 10, p. 621-633, 2016. DOI : [10.1007/s00193-016-0673-9](https://doi.org/10.1007/s00193-016-0673-9).
- [90] V. I. MANZHALEI et V. A. SUBBOTIN, « Stability of an overcompressed gas detonation, » *Combustion, Explosion and Shock Waves*, t. 12, p. 819-825, 1976. DOI : [10.1007/BF00740759](https://doi.org/10.1007/BF00740759).
- [91] S. I. JACKSON et M. SHORT, « The influence of the cellular instability on lead shock evolution in weakly unstable detonation, » *Combustion and Flame*, t. 160, n° 10, p. 2260-2274, 2013, ISSN : 0010-2180. DOI : [10.1016/j.combustflame.2013.04.028](https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2013.04.028).
- [92] R. A. STREHLOW, R. LIAUGMINAS, R. H. WATSON et J. R. EYMAN, « Transverse wave structure in detonations, » *Symposium (International) on Combustion*, t. 11, n° 1, p. 683-692, 1967, ISSN : 0082-0784. DOI : [10.1016/S0082-0784\(67\)80194-2](https://doi.org/10.1016/S0082-0784(67)80194-2).
- [93] R. A. STREHLOW et C. D. ENGEL, « Transverse Waves in Detonations : II. Structure and Spacing in H<sub>2</sub>—O<sub>2</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>—O<sub>2</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>—O<sub>2</sub>, and CH<sub>4</sub>—O<sub>2</sub> Systems, » *AIAA J.*, t. 7, n° 8, p. 492-496, 1969.
- [94] V. I. MANZHALEI, « Fine structure of the leading front of a gas detonation, » *Combustion, Explosion and Shock Waves*, t. 13, p. 402-404, 1977. DOI : [10.1007/BF00740325](https://doi.org/10.1007/BF00740325).
- [95] C. PAILLARD, G. DUPRÉ, H. A. AITEH et S. YOUSSEFI-STITOU, « Influence de la cinétique chimique sur la structure des détonations : cas du bioxyde de chlore, » *Annales de Physique*, 1989, p. 641-648. DOI : [10.1051/anphys:01989001406064100](https://doi.org/10.1051/anphys:01989001406064100).
- [96] P. V. TIGGELEN et J. LIBOUTON, « Évolution des variables chimiques et physiques à l'intérieur d'une maille de détonation, » *Ann. Phys. Fr.*, t. 14, n° 6, p. 649-660, 1989. DOI : [10.1051/anphys:01989001406064900](https://doi.org/10.1051/anphys:01989001406064900).
- [97] M. SHORT et G. J. SHARPE, « Pulsating instability of detonations with a two-step chain-branching reaction model : theory and numerics, » *Combust. Theor. Model.*, t. 7, n° 2, p. 401-416, 2003. DOI : [10.1088/1364-7830/7/2/311](https://doi.org/10.1088/1364-7830/7/2/311).

- [98] M. RADULESCU, G. SHARPE et D. BRADLEY, « A universal parameter quantifying explosion hazards, detonability and hot spot formation :  $\chi$  number, » *Proceedings of the 7<sup>th</sup> International Seminar on Fire and Explosion, Hazards*, D. BRADLEY, G. MAKHVILADZE, V. MOLKOV, P. SUNDERLAND et F. TAMANINI, éd., Research Publishing, 2013, p. 617-626. DOI : [10.3850/978-981-07-5936-0\\_10-01](https://doi.org/10.3850/978-981-07-5936-0_10-01).
- [99] V. A. SUBBOTIN, « Two kinds of transverse wave structures in multifront detonation, » *Combustion, Explosion and Shock Waves*, t. 11, p. 83-88, 1975. DOI : [10.1007/BF00742862](https://doi.org/10.1007/BF00742862).
- [100] M. RADULESCU, « The propagation and failure mechanism of gaseous detonations : experiments in porous-walled tubes, » thèse de doct., McGill University, 2003.
- [101] J. DOVE et H. WAGNER, « A photographic investigation of the mechanism of spinning detonation, » *Symposium (International) on Combustion*, t. 8, n° 1, p. 589-600, 1961, Eighth Symposium (International) on Combustion, ISSN : 0082-0784. DOI : [10.1016/S0082-0784\(06\)80550-3](https://doi.org/10.1016/S0082-0784(06)80550-3).
- [102] G. L. SCHOTT, « Observations of the Structure of Spinning Detonation, » *The Physics of Fluids*, t. 8, n° 5, p. 850-865, 1965. DOI : [10.1063/1.1761328](https://doi.org/10.1063/1.1761328).
- [103] A. MACPHERSON, « The three-dimensional wave system of spinning detonation, » *Symposium (International) on Combustion*, t. 12, n° 1, p. 839-850, 1969, ISSN : 0082-0784. DOI : [10.1016/S0082-0784\(69\)80465-0](https://doi.org/10.1016/S0082-0784(69)80465-0).
- [104] B. VOITSEKHOVSKII, V. MITROFANOV et M. TOPCHIAN, « Investigation of the structure of detonation waves in gases, » *Symposium (International) on Combustion*, t. 12, n° 1, p. 829-837, 1969, ISSN : 0082-0784. DOI : [10.1016/S0082-0784\(69\)80464-9](https://doi.org/10.1016/S0082-0784(69)80464-9).
- [105] R. A. STREHLOW, « Gas phase detonations : Recent developments, » *Combustion and Flame*, t. 12, n° 2, p. 81-101, 1968, ISSN : 0010-2180. DOI : [10.1016/0010-2180\(68\)90083-7](https://doi.org/10.1016/0010-2180(68)90083-7).
- [106] B. V. VOITSEKHOVSKII, V. V. MITROFANOV et M. E. TOPCHIYAN, « Structure of the detonation front in gases, » *Combustion, Explosion, and Shock Waves*, t. 5, p. 267-273, DOI : [10.1007/BF00748606](https://doi.org/10.1007/BF00748606).
- [107] R. A. STREHLOW, « Investigation of the structure of detonation waves in gases, » *Astronautica Acta*, t. 15, n° 5-6, p. 345-357, 1970.
- [108] D. N. WILLIAMS, L. BAUWENS et E. S. ORAN, « Detailed structure and propagation of three-dimensional detonations, » *Symposium (Int.) on Combustion*, t. 26, n° 2, p. 2991-2998, 1996, ISSN : 0082-0784. DOI : [https://doi.org/10.1016/S0082-0784\(96\)80142-1](https://doi.org/10.1016/S0082-0784(96)80142-1).

- [109] M. HANANA, M. H. LEFEBVRE et P. J. VAN TIGGELEN, « On Rectangular and Diagonal Three-Dimensional Structures of Detonation Waves, » *Int. Coll. on Advances in Experimentation & Computation of Detonations*, 1998.
- [110] M. HANANA, M. LEFEBVRE et P. J. V. TIGGELEN, « Pressure profiles in detonation cells with rectangular and diagonal structures, » *Shock Waves*, t. 11, p. 77-88, 2001. DOI : <https://doi.org/10.1007/PL00004068>.
- [111] V. DELEDICQUE et M. V. PAPALEXANDRIS, « Computational study of three-dimensional gaseous detonation structures, » *Combustion and Flame*, t. 144, n° 4, p. 821-837, 2006, ISSN : 0010-2180. DOI : [10.1016/j.combustflame.2005.09.009](https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2005.09.009).
- [112] H.-S. DOU, H. M. TSAI, B. C. KHOO et J. QIU, « Simulations of detonation wave propagation in rectangular ducts using a three-dimensional WENO scheme, » *Combustion and Flame*, t. 154, n° 4, p. 644-659, 2008, ISSN : 0010-2180. DOI : [10.1016/j.combustflame.2008.06.013](https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2008.06.013).
- [113] N. TSUBOI, S. KATOH et A. K. HAYASHI, « Three-dimensional numerical simulation for hydrogen/air detonation : Rectangular and diagonal structures, » *Proceedings of The Combustion Institute*, t. 29, p. 2783-2788, déc. 2002. DOI : [10.1016/S1540-7489\(02\)80339-X](https://doi.org/10.1016/S1540-7489(02)80339-X).
- [114] K. ETO, N. TSUBOI et A. K. HAYASHI, « Numerical study on three-dimensional C-J detonation waves : detailed propagating mechanism and existence of OH radical, » *Proceedings of the Combustion Institute*, t. 30, n° 2, p. 1907-1913, 2005, ISSN : 1540-7489. DOI : [10.1016/j.proci.2004.08.169](https://doi.org/10.1016/j.proci.2004.08.169).
- [115] R. DEITERDING, « Numerical structure analysis of regular hydrogen-oxygen detonations, » *WSSCI Fall 2003 Meeting : Session 03F-28*, 2003.
- [116] C. WANG, C.-W. SHU, W. HAN et J. NING, *Combustion and Flame*, t. 160, n° 2, p. 447-462, 2013, ISSN : 0010-2180. DOI : [10.1016/j.combustflame.2012.10.002](https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2012.10.002).
- [117] S. BORISOV et A. KUDRYAVTSEV, « Investigation of cellular detonation structure formation via linear stability theory and 2D and 3D numerical simulations, » cited By 4, t. 1893, 2017. DOI : [10.1063/1.5007500](https://doi.org/10.1063/1.5007500).
- [118] S. TAILEB, M. REYNAUD, A. CHINNAYYA, F. VIROT et P. BAUER, « Numerical study of 3D gaseous detonations in a square channel., » *Aerotec. Missili Spaz.*, t. 97, p. 96-102, 2018. DOI : [10.1007/BF03405804](https://doi.org/10.1007/BF03405804).
- [119] H. PRESLES, D. DESBORDES et P. BAUER, « An optical method for the study of the detonation front structure in gaseous explosive mixtures, » *Combustion and Flame*, t. 70, n° 2, p. 207-213, 1987, ISSN : 0010-2180. DOI : [10.1016/0010-2180\(87\)90079-4](https://doi.org/10.1016/0010-2180(87)90079-4).

- [120] A. STARR, J. H. LEE et H. D. NG, « Detonation limits in rough walled tubes, » *Proceedings of the Combustion Institute*, t. 35, n° 2, p. 1989-1996, 2015, ISSN : 1540-7489. DOI : [10.1016/j.proci.2014.06.130](https://doi.org/10.1016/j.proci.2014.06.130).
- [121] B. ZHANG, « The influence of wall roughness on detonation limits in hydrogen–oxygen mixture, » *Combustion and Flame*, t. 169, p. 333-339, 2016, ISSN : 0010-2180. DOI : [10.1016/j.combustflame.2016.05.003](https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2016.05.003).
- [122] G. CICCARELLI et S. DOROFEEV, « Flame acceleration and transition to detonation in ducts, » *Progress in Energy and Combustion Science*, t. 34, n° 4, p. 499-550, 2008, ISSN : 0360-1285. DOI : [10.1016/j.pecs.2007.11.002](https://doi.org/10.1016/j.pecs.2007.11.002).
- [123] J. H. GLADSTONE et T. P. DALE, « Researches on the refraction, dispersion, and sensitiveness of liquids, » *Philosophical Transactions of the Royal Society of London*, t. 153, n° 14, p. 317-343, 1863. DOI : [10.1098/rstl.1863.0014](https://doi.org/10.1098/rstl.1863.0014).
- [124] J. CRANE, J. T. LIPKOWICZ, X. SHI, I. WLOKAS, A. M. KEMPF et H. WANG, « Three-dimensional detonation structure and its response to confinement, » *Proc. Combustion Institute*, 2022, ISSN : 1540-7489. DOI : [10.1016/j.proci.2022.10.019](https://doi.org/10.1016/j.proci.2022.10.019).
- [125] J. A. FAY, « Two-Dimensional Gaseous Detonations : Velocity Deficit, » *The Physics of Fluids*, t. 2, p. 283, 1959. DOI : [10.1063/1.1705924](https://doi.org/10.1063/1.1705924).
- [126] Y. GAO, B. ZHANG, H. D. NG et J. H. LEE, « An experimental investigation of detonation limits in hydrogen–oxygen–argon mixtures, » *International Journal of Hydrogen Energy*, t. 41, n° 14, p. 6076-6083, 2016, ISSN : 0360-3199. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2016.02.130>.
- [127] W. W. WOOD et J. G. KIRKWOOD, « Diameter effect in condensed explosives. The relation between velocity and radius of curvature of the detonation wave, » *J. Chem. Phys.*, t. 22, p. 1920-1924, 11 1954. DOI : [10.1063/1.1739940](https://doi.org/10.1063/1.1739940).
- [128] J. B. BDZIL, « Steady-state two-dimensional detonation, » *J. Fluid Mech.*, t. 108, p. 195-226, 1981. DOI : [10.1017/S0022112081002085](https://doi.org/10.1017/S0022112081002085).
- [129] M. CHIQUETE et M. SHORT, « Characteristic path analysis of confinement influence on steady two-dimensional detonation propagation, » *J. Fluid Mech.*, t. 863, p. 789-816, 2019. DOI : [10.1017/jfm.2018.995](https://doi.org/10.1017/jfm.2018.995).
- [130] C. GUIRAO, R. KNYSTAUTAS, J. LEE, W. BENEDICK et M. BERMAN, « Hydrogen-air detonations, » *Symposium (International) on Combustion*, t. 19, n° 1, p. 583-590, 1982, Nineteenth Symposium (International) on Combustion, ISSN : 0082-0784. DOI : [10.1016/S0082-0784\(82\)80232-4](https://doi.org/10.1016/S0082-0784(82)80232-4).

- [131] R. K. KUMAR, « Detonation Cell Widths in Hydrogen/Oxygen/Diluent Mixtures, » *Combustion and Flame*, t. 80, p. 157-169, 1990.
- [132] S. BOULAL, « Comportements dynamiques de la détonation dans les écoulements des compositions gazeuses non-uniformes, » thèse de doct., École Nationale Supérieure de Mécanique et d'Aérotechnique, 2017.
- [133] Y. LIU, J. LEE et R. KNYSTAUTAS, « Effect of geometry on the transmission of detonation through an orifice, » *Combustion and Flame*, t. 56, n° 2, p. 215-225, 1984, ISSN : 0010-2180. DOI : [10.1016/0010-2180\(84\)90038-5](https://doi.org/10.1016/0010-2180(84)90038-5).
- [134] V. RODRIGUEZ, C. JOURDAIN, P. VIDAL et R. ZITOUN, « An experimental evidence of steadily-rotating overdriven detonation, » *Combustion and Flame*, t. 202, p. 132-142, 2019, ISSN : 0010-2180. DOI : [10.1016/j.combustflame.2019.01.016](https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2019.01.016).
- [135] D. H. EDWARDS, G. O. THOMAS et M. A. NETTLETON, « The diffraction of a planar detonation wave at an abrupt area change, » *Journal of Fluid Mechanics*, t. 95, n° 1, p. 79-96, 1979. DOI : [10.1017/S002211207900135X](https://doi.org/10.1017/S002211207900135X).
- [136] E. PANTOW, M. FISCHER et T. KRATZEL, « Decoupling and recoupling of detonation waves associated with sudden expansion, » *Shock Waves*, n° 6, p. 131-137, 1996. DOI : [10.1007/BF02510993](https://doi.org/10.1007/BF02510993).
- [137] A. FEDOROV, T. KHMEL et Y. KRATOVA, « Shock and detonation wave diffraction at a sudden expansion in gas-particle mixtures, » *Shock Waves*, t. 18, p. 281-290, 2007. DOI : [10.1007/s00193-008-0162-x](https://doi.org/10.1007/s00193-008-0162-x).
- [138] V. LEVIN, I. MANUYLOVICH et V. MARKOV, « Cellular structure of divergent cylindrical detonation waves, » *Dokl. Phys.*, t. 56, p. 391-393, 2011. DOI : [10.1134/S1028335811070020](https://doi.org/10.1134/S1028335811070020).
- [139] R. KNYSTAUTAS, J. LEE et C. GUIRAO, « The critical tube diameter for detonation failure in hydrocarbon-air mixtures, » *Combustion and Flame*, t. 48, p. 63-83, 1982, ISSN : 0010-2180. DOI : [https://doi.org/10.1016/0010-2180\(82\)90116-X](https://doi.org/10.1016/0010-2180(82)90116-X).
- [140] S. M. KOGARKO, *Izv. Akad. Nauk SSSR, Otd. Khim. Nauk*, 1956.
- [141] B. KHASAINOV, H.-N. PRESLES, D. DESBORDES, P. DEMONTIS et P. VIDAL, « Detonation diffraction from circular tubes to cones, » *Shock Waves*, t. 17, p. 187-192, 2003. DOI : [10.1007/s00193-005-0262-9](https://doi.org/10.1007/s00193-005-0262-9).
- [142] R. A. STREHLOW et R. J. SALM, « The failure of marginal detonations in expanding channels, » *Acta Astronautica*, t. 3, n° 11, p. 983-994, 1976, ISSN : 0094-5765. DOI : [10.1016/0094-5765\(76\)90007-2](https://doi.org/10.1016/0094-5765(76)90007-2).

- [143] G. THOMAS, D. H. EDWARDS, J. H. LEE, R. KNYSTAUTAS, I. O. MOEN et Y. M. WEI, « Detonation Diffraction by Divergent Channels, » *Dynamics of Explosions*, J.-C. LEYER, R. SOLOUKHIN et J. BOWEN, éd., 1986, p. 144-154. DOI : [10.2514/5.9781600865800.0144.0154](https://doi.org/10.2514/5.9781600865800.0144.0154).
- [144] A. BORISOV, S. V. KHOMIK et E. V. SANEEVT, « Critical energy of direct detonation initiation in gaseous mixtures, » *Dynamics of Detonations and Explosions : Detonations*, t. 133, AIAA, 1989, p. 142-155. DOI : [10.2514/5.9781600866067.0142.0155](https://doi.org/10.2514/5.9781600866067.0142.0155).
- [145] R. SORIN, R. ZITOUN, B. KHASAINOV et D. DESBORDES, « Detonation diffraction through different geometries, » *Shock Waves*, t. 19, p. 11-23, 2009. DOI : [10.1007/s00193-008-0179-1](https://doi.org/10.1007/s00193-008-0179-1).
- [146] T. ENDO, R. KOBAYASHI, S. KUWAJIMA, Y. SEKI, W. KIM et T. JOHZAKI, « Detonation propagation from a cylindrical tube into a diverging cone, » *Journal of Thermal Science and Technology*, t. 15, n° 3, 2020. DOI : [10.1299/jtst.2020jtst0030](https://doi.org/10.1299/jtst.2020jtst0030).
- [147] S. A. GUBIN, S. M. KOGARKO et V. N. MIKHALKIN, « Experimental study of gas detonation in conical tubes, » *Combustion, Explosion and Shock Waves*, t. 18, p. 592-597, 1982. DOI : [10.1007/BF00800631](https://doi.org/10.1007/BF00800631).
- [148] V. RODRIGUEZ, V. MONNIER, P. VIDAL et R. ZITOUN, « Non-dimensionalized distances and limits for the transition of deflagration to detonation, » *Shock Waves*, t. 32, p. 417-425, 2022. DOI : [10.1007/s00193-022-01088-0](https://doi.org/10.1007/s00193-022-01088-0).
- [149] J. LEE, R. KNYSTAUTAS et N. YOSHIKAWA, « Photochemical initiation of gaseous detonations, » *Acta Astronautica*, t. 5, n° 11, p. 971-982, 1978, ISSN : 0094-5765. DOI : [10.1016/0094-5765\(78\)90003-6](https://doi.org/10.1016/0094-5765(78)90003-6).
- [150] N. YOSHIKAWA, « Coherent shock wave amplification in photochemical initiation of gaseous detonations, » thèse de doct., McGill University, 1978.
- [151] G. CICCARELLI et J. BOCCIO, « Detonation wave propagation through a single orifice plate in a circular tube, » *Symposium (International) on Combustion*, t. 27, n° 2, p. 2233-2239, 1998, ISSN : 0082-0784. DOI : [10.1016/S0082-0784\(98\)80072-6](https://doi.org/10.1016/S0082-0784(98)80072-6).
- [152] A. A. VASIL'EV, « Diffraction of multifront detonation, » *Combustion, Explosion and Shock Waves*, t. 24, p. 92-99, 1988. DOI : [10.1007/s00193-012-0409-4](https://doi.org/10.1007/s00193-012-0409-4).
- [153] F. PINTGEN et J. SHEPHERD, « Detonation diffraction in gases, » *Combustion and Flame*, t. 156, n° 3, p. 665-677, 2009, ISSN : 0010-2180. DOI : [10.1016/j.combustflame.2008.09.008](https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2008.09.008).

- [154] O. PERALDI, R. KNYSTAUTAS et J. LEE, « Criteria for transition to detonation in tubes, » *Symposium (International) on Combustion*, t. 21, n° 1, p. 1629-1637, 1988, Twenty-First Symposium (International on Combustion), ISSN : 0082-0784. DOI : [10.1016/S0082-0784\(88\)80396-5](https://doi.org/10.1016/S0082-0784(88)80396-5).
- [155] J. CRANE, X. SHI, A. V. SINGH, Y. TAO et H. WANG, « Isolating the effect of induction length on detonation structure : Hydrogen–oxygen detonation promoted by ozone, » *Combustion and Flame*, t. 200, p. 44-52, 2019, ISSN : 0010-2180. DOI : [10.1016/j.combustflame.2018.11.008](https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2018.11.008).
- [156] G. JOULIN et P. VIDAL, « An introduction to the instability of flames, shocks, and detonations, » *Hydrodynamics and Nonlinear Instabilities*, sér. Collection Alea-Saclay : Monographs and Texts in Statistical Physics, C. GODRÈCHE et P. E. MANNEVILLE, éd., Cambridge University Press, 1998, p. 493-674. DOI : [10.1017/CB09780511524608.007](https://doi.org/10.1017/CB09780511524608.007).
- [157] P. CLAVIN, « Instabilities and Nonlinear Patterns of Overdriven Detonations in Gases, » *Nonlinear PDE's in Condensed Matter and Reactive Flows*, H. BERESTYCKI et Y. POMEAU, éd. Dordrecht : Springer Netherlands, 2002, p. 49-97, ISBN : 978-94-010-0307-0. DOI : [10.1007/978-94-010-0307-0\\_3](https://doi.org/10.1007/978-94-010-0307-0_3).
- [158] P. CLAVIN et F. A. WILLIAMS, « Analytical studies of the dynamics of gaseous detonations, » *Philos. Trans. A : Math. Phys. Eng. Sci.*, t. 370, p. 597-624, 2012. DOI : [10.1098/rsta.2011.0345](https://doi.org/10.1098/rsta.2011.0345).
- [159] H. O. BARTHEL, « Reaction Zone-Shock Front Coupling in Detonations, » *Phys. Fluids*, t. 15, n° 1, p. 43-50, 1972. DOI : [10.1063/1.1693753](https://doi.org/10.1063/1.1693753).
- [160] H. O. BARTHEL, « Predicted spacings in hydrogen-oxygen-argon detonations, » *The Physics of Fluids*, t. 17, n° 1547, 1974. DOI : [10.1063/1.1694932](https://doi.org/10.1063/1.1694932).
- [161] R. A. STREHLOW, R. E. MAURER et R. S., « Transverse waves in detonations : I. Spacing in the Hydrogen-Oxygen System, » *AIAA J.*, t. 7, p. 323-328, 1969. DOI : [10.2514/3.5093](https://doi.org/10.2514/3.5093).
- [162] J. CRANE, X. SHI, J. T. LIPKOWICZ, A. M. KEMPF et H. WANG, « Geometric modeling and analysis of detonation cellular stability, » *Proc. Combust. Inst.*, t. 38, n° 3, p. 3585-3593, 2021, ISSN : 1540-7489. DOI : [10.1016/j.proci.2020.06.278](https://doi.org/10.1016/j.proci.2020.06.278).
- [163] K. CHEEVERS et M. RADULESCU, *Ignition Behind Decaying Shock Waves : Detonation Cells*, 2022.

- [164] V. A. VOLIN, Y. K. TROSHIN, G. I. FILATOV et K. I. SHCHELKIN, « On the reactional kinetic nature of non-uniformities in the shock front and their role in the process of gaseous detonation propagation (in Russian), » *J. Appl. Mech. and Tech. Phys.*, t. 2, p. 78-89, 1960.
- [165] A. GAVRIKOV, A. EFIMENKO et S. DOROFEEV, « A model for detonation cell size prediction from chemical kinetics, » *Combustion and Flame*, t. 120, n° 1, p. 19-33, 2000, ISSN : 0010-2180. DOI : [10.1016/S0010-2180\(99\)00076-0](https://doi.org/10.1016/S0010-2180(99)00076-0).
- [166] G. BAKALIS, M. VALIPOUR, J. BENTAHAR, L. KADEM, H. TENG et H. D. NG, « Detonation cell size prediction based on artificial neural networks with chemical kinetics and thermodynamic parameters, » *Fuel Communications*, t. 14, p. 100 084, 2023, ISSN : 2666-0520. DOI : [10.1016/j.jfueco.2022.100084](https://doi.org/10.1016/j.jfueco.2022.100084).
- [167] F. AURENHAMMER et R. KLEIN, « Voronoi Diagrams, » *Handbook of Computational Geometry*, J.-R. SACK et J. URRUTIA, éd., Amsterdam : North-Holland, 2000, p. 204-209, ISBN : 978-0-444-82537-7. DOI : [10.1016/B978-044482537-7/50006-1](https://doi.org/10.1016/B978-044482537-7/50006-1).
- [168] S. F. VASSALLO, « Buffon's coin and needle problems for the snub hexagonal tiling, » *Advances in Mathematics : Scientific Journal*, t. 10, p. 2223-2233, avr. 2021. DOI : [10.37418/amsj.10.4.36](https://doi.org/10.37418/amsj.10.4.36).
- [169] F. H. V. COPPENS, J. DE RUYCK et A. A. KONNOV, « The effects of composition on burning velocity and nitric oxide formation in laminar premixed flames of  $\text{CH}_4 + \text{H}_2 + \text{O}_2 + \text{N}_2$ , » *Combustion and Flame*, t. 149, n° 4, p. 409-417, 2007, ISSN : 0010-2180. DOI : [10.1016/j.combustflame.2007.02.004](https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2007.02.004).
- [170] MECHANICAL AND AEROSPACE ENGINEERING (COMBUSTION RESEARCH), *Chemical-Kinetic Mechanisms for Combustion Applications*.
- [171] G. P. SMITH, Y. TAO et H. WANG, *Foundational Fuel Chemistry Model Version 1.0 (FFCM-1) 2016*, 2016.
- [172] D. W. STAMPS et S. R. TIESZEN, « The influence of initial pressure and temperature on hydrogen-air-diluent detonations, » *Combustion and Flame*, t. 83, n° 3, p. 353-364, 1991, ISSN : 0010-2180. DOI : [10.1016/0010-2180\(91\)90082-M](https://doi.org/10.1016/0010-2180(91)90082-M).
- [173] S. TIESZEN, M. SHERMAN, W. BENEDICK et J. SHEPHERD, « Detonation Cell Size Measurements in Hydrogen-Air-Stream Mixtures, » *Dynamics of Explosions*, J.-C. LEYER, R. SOLOUKHIN et J. BOWEN, éd., American Institute of Aeronautics et Astronautics, 1986, p. 205-219. DOI : [10.2514/5.9781600865800.0205.0219](https://doi.org/10.2514/5.9781600865800.0205.0219).



- [174] G. CICCARELLI, T. GINSBERG, J. BOCCIO, C. ECONOMOS, K. SATO et M. KINOSHITA, « Detonation cell size measurements and predictions in hydrogen-air-steam mixtures at elevated temperatures, » *Combustion and Flame*, t. 99, n° 2, p. 212-220, 1994, 25th Symposium (International) on Combustion Papers, ISSN : 0010-2180. DOI : [10.1016/0010-2180\(94\)90124-4](https://doi.org/10.1016/0010-2180(94)90124-4).
- [175] G. CICCARELLI, T. GINSBERG et J. L. BOCCIO, « Detonation cell size measurements in high-temperature hydrogen-air-steam mixtures at the BNL high-temperature combustion facility, » nov. 1997. DOI : [10.2172/563843](https://doi.org/10.2172/563843).
- [176] R. KNYSTAUTAS et J. H. S. LEE, « Large-Scale Experiments on the Transmission of Fuel-Air Detonations from Two-Dimensional Channels, » *Dynamics of Shock Waves, Explosions, and Detonations*, R. I. SOLOUKHIN, A. K. OPPENHEIM, N. MANSON et J. R. BOWEN, éd., American Institute of Aeronautics et Astronautics, 1984, p. 546-555. DOI : [10.2514/5.9781600865695.0546.0555](https://doi.org/10.2514/5.9781600865695.0546.0555).
- [177] D. DESBORDES, « Aspects stationnaires et transitoires de la détonation dans les gaz : relation avec la structure cellulaire du front, » thèse de doct., Université de Poitiers, 1990.
- [178] R. ZITOUN, D. DESBORDES, C. GUERRAND et B. DESHAIES, « Direct initiation of detonation in cryogenic gaseous  $H_2-O_2$  mixtures, » *Shock Waves*, t. 4, p. 331-337, 1995. DOI : [10.1007/BF01413875](https://doi.org/10.1007/BF01413875).
- [179] J. H. LEE et H. MATSUI, « A comparison of the critical energies for direct initiation of spherical detonations in acetylene-oxygen mixtures, » *Combustion and Flame*, t. 28, p. 61-66, 1977, ISSN : 0010-2180. DOI : [10.1016/0010-2180\(77\)90008-6](https://doi.org/10.1016/0010-2180(77)90008-6).
- [180] J. H. LEE, B. H. K. LEE et R. KNYSTAUTAS, « Direct Initiation of Cylindrical Gaseous Detonations, » *The Physics of Fluids*, t. 9, n° 1, p. 221-222, jan. 1966, ISSN : 0031-9171. DOI : [10.1063/1.1761523](https://doi.org/10.1063/1.1761523).
- [181] M. AMINALLAH, J. BROSSARD et A. VASILIEV, « Cylindrical detonations in methane-oxygen-nitrogen mixtures, » *Prog. Astronaut. Aeronaut.*, t. 153, p. 203-228, 1984.
- [182] S. LABERGE, R. KNYSTAUTAS et J. H. S. LEE, « Propagation and Extinction of Detonation Waves in Tube Bundles, » *Dynamic aspects of detonations*, A. KUHL, J. LEYER, A. BORISOV et W. SIRIGNANO, éd., American Institute of Aeronautics et Astronautics, 1993, p. 381-396. DOI : [10.2514/5.9781600866265.0381.0396](https://doi.org/10.2514/5.9781600866265.0381.0396).
- [183] S. ABID, G. DUPRÉ et C. PAILLARD, « Oxidation of Gaseous Unsymmetrical Dimethylhydrazine at High Temperatures and Detonation of UDMH/ $O_2$  Mixtures, » *Dynamic aspects of detonations*, A. KUHL, J. LEYER, A. BORISOV et W. SIRIGNANO,

- éd., American Institute of Aeronautics et Astronautics, 1991, p. 162-181. DOI : [10.2514/5.9781600866265.0162.0181](https://doi.org/10.2514/5.9781600866265.0162.0181).
- [184] M. PEDLEY et al., « Hydrazine Vapor Detonation, » *Prog. Astronaut. Aeronaut.*, t. 114, p. 45-63, 1988. DOI : [10.2514/5.9781600865800.0205.0219](https://doi.org/10.2514/5.9781600865800.0205.0219).
- [185] I. MOEN, J. FUNK, S. WARD, G. RUDE et P. THIBAUT, « Detonation length scales for fuel-air explosives, » *Prog. Astronaut. Aeronaut.*, t. 94, p. 55-79, 1984. DOI : [10.2514/5.9781600865695.0055.0079](https://doi.org/10.2514/5.9781600865695.0055.0079).
- [186] S. MURRAY et J. LEE, « The influence of yielding confinement on large-scale ethylene-air detonations, » *Dynamics of Shock Waves, Explosions, and Detonations*, R. I. SOLOUKHIN, A. K. OPPENHEIM, N. MANSON et J. R. BOWEN, éd., American Institute of Aeronautics et Astronautics, 1984, p. 80-103. DOI : [10.2514/5.9781600865695.0080.0103](https://doi.org/10.2514/5.9781600865695.0080.0103).
- [187] D. BULL, J. ELSWORTH, P. SHUFF et E. METCALFE, « Detonation cell structures in fuel/air mixtures, » *Combustion and Flame*, t. 45, p. 7-22, 1982, ISSN : 0010-2180. DOI : [https://doi.org/10.1016/0010-2180\(82\)90028-1](https://doi.org/10.1016/0010-2180(82)90028-1).
- [188] A. A. KONNOV, « Yet another kinetic mechanism for hydrogen combustion, » *Combustion and Flame*, t. 203, p. 14-22, 2019, ISSN : 0010-2180. DOI : [10.1016/j.combustflame.2019.01.032](https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2019.01.032).
- [189] P. CALKA, « An explicit expression of the distribution of the number of sides of the typical Poisson-Voronoi cell, » *J. Appl. Probab.*, t. 35, p. 863-870, 2003. DOI : [10.1239/aap/1067436323](https://doi.org/10.1239/aap/1067436323).
- [190] R. E. MILES et R. J. MAILLARDET, « The basic structures of Voronoi and generalized Voronoi polygons, » *J. Appl. Probab.*, t. 19, p. 97-111, 1982. DOI : [10.2307/3213553](https://doi.org/10.2307/3213553).



# Abstract

The mean width and the regularity of the cellular structures of detonation fronts in gases are important parameters of detonation dynamics. This width is often considered as a similarity parameter and constitutes a criterion of relative detonability useful for presizing applicative devices, such as rotating detonation engines or mitigation systems. However, the phenomenological analysis of detonation cells remains a fundamental problem in the dynamics of reactive compressible fluids, experimentally, numerically and theoretically.

Our study focuses on three sets of dynamic behaviours of cell detonation depending on the shape - square or round - of the section of the detonation tube. These are the geometric properties of its cells in straight and wide tubes, the non-monotonic dynamics of its expansion in a tube of moderately increasing cross-section and its re-ignition after diffraction by an obstacle. We made recordings on soot-coated plates and by high-speed shadowgraph or chemiluminescence cinematography.

The front views show cells that become irregular as their number increases, even though they are initially regular. However, their parietal recordings can remain regular, depending on the mixture. In our conditions, the limiting cell widths reached at the largest cross-section areas are smaller in the tubes with constant area than with increasing cross-sections for the same cross-section area. The mechanisms after diffraction by an obstacle are very different, depending on its open-area ratio and the shape of the tube cross-section. The re-ignition distances are smaller with the square cross-section.

That indicates a persistent influence of the cross-section shape and edge effects at large dimensions in steady situations and at long times in transient unsteady situations. These effects modify all the cell descriptors, *i.e.* its aspect ratio, mean width, regularity and the shape of its front view.

We propose the notion of a self-contained cell structure for sufficiently large numbers of cells. In these situations, the dynamics of a cell is determined only by its interaction with its neighbours. The characteristic time of the cell beat is very small compared with the time it takes a transverse wave to travel through the tube cross-section. Therefore, the local fluctuations in the flow dynamics on the scale of the cell beating time dominate the forced dynamics that could be imposed on the transverse waves by a square or rectangular section of the tube, depending on the mixture and its initial pressure. Local disturbances act faster than global dynamics.

We have developed a model that accurately predicts the mean width based on the principle that the cellular and theoretical processes have the same mass combustion rate, relative to their respective - but different - combustion times, so that each gives the same mean detonation velocity. Under the assumptions that the stochastic motion of the transverse waves is stationary ergodic and the cellular process adiabatic, its ingredients are then graph theory, geometric probabilities and the Zeldovich-von Neuman-Döring model of detonation. We emphasise that non-adiabatic cellular mechanisms produce cells that are too irregular for the average of their widths to have any physical meaning.

These results emphasize the three-dimensional nature of the local and global dynamic behaviour of detonations. From a modelling point of view, they place new constraints on qualitative and quantitative predictions of numerical simulations. From an application point of view, their sensitivity and complexity suggest undertaking design and production studies at a technological readiness level sufficiently close to the conditions imposed by operational equipment.

**Key words :** Chemiluminescence, Combustion, Compressibility, Fluid dynamics, Hydrogen, Detonation waves, Oxygen, Cellular structure, Ergodic theory

