



HAL
open science

Simulations mésoscopiques d'un matériau énergétique pour la transition du choc à la détonation

Jérôme Saunier

► **To cite this version:**

Jérôme Saunier. Simulations mésoscopiques d'un matériau énergétique pour la transition du choc à la détonation. Autre. ISAE-ENSMA Ecole Nationale Supérieure de Mécanique et d'Aérotechnique - Poitiers, 2024. Français. NNT : 2024ESMA0027 . tel-04901150

HAL Id: tel-04901150

<https://theses.hal.science/tel-04901150v1>

Submitted on 20 Jan 2025

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

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

THÈSE

POUR L'OBTENTION DU GRADE DE

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

(DIPLOME NATIONAL - ARRÊTÉ DU 25 MAI 2016)

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

SECTEUR DE RECHERCHE : ÉNERGÉTIQUE, THERMIQUE, COMBUSTION

PRÉSENTÉE PAR :

JÉRÔME SAUNIER

SIMULATIONS MÉSCOSCOPIQUES D'UN MATÉRIAU ÉNERGÉTIQUE POUR LA TRANSITION DU CHOC À LA DÉTONATION

Directeur de thèse : **ASHWIN CHINNAYYA**

SOUTENUE LE 21 OCTOBRE 2024
DEVANT LA COMMISSION D'EXAMEN

JURY :

RAPPORTEURS

M. LÉO COURTY (PRÉSIDENT),	PROFESSEUR DES UNIVERSITÉS	UNIVERSITÉ D'ORLÉANS
M. STANY GALLIER,	INGÉNIEUR DE RECHERCHE, HDR	ARIANE GROUP

MEMBRES

M. ASHWIN CHINNAYYA,	PROFESSEUR DES UNIVERSITÉS	INSTITUT P' – ISAE-ENSMA
M. DIDIER PICART,	INGÉNIEUR DE RECHERCHE, HDR	CEA-DAM, LE RIPALT
MME ISABELLE SOCHET,	PROFESSEUR DES UNIVERSITÉS	INSA VAL DE LOIRE
M. ÉRIC FOUSSON,	INGÉNIEUR DE RECHERCHE	INSTITUT SAINT LOUIS
M. MARC GENETIER (INVITÉ),	INGÉNIEUR DE RECHERCHE	CEA-DAM, GRAMAT

Remerciements

Je tiens tout d'abord à remercier Léo COURTY et Stany GALLIER pour avoir accepté d'être rapporteurs et de relire ce manuscrit. J'aimerais également remercier Didier PICART, Éric FOUSSON et Isabelle SOCHET pour avoir accepté de participer au jury de cette thèse ainsi que pour les remarques et discussions apportées au cours de la soutenance.

J'aimerais ensuite adresser mes remerciements les plus sincères à mon directeur de thèse, Ashwin CHINNAYYA, ainsi qu'à mes encadrants du CEA Gramat : Marc GENETIER, Élodie KAESHAMMER et Maxime REYNAUD. Je ne pouvais rêver d'un meilleur encadrement. Je me souviens encore des premières réunions où les idées fusaient de toute part et dont je peinais à suivre le flot. Puis le doctorant grandit, et un jour on se surprend à mener les réunions. Merci à tous pour votre patience, votre disponibilité et votre bienveillance.

Je te remercie Ashwin pour tes visites régulières dans le causse lotois et pour tous les échanges qu'on a pu avoir en visio ou par téléphone. Je te remercie Marc pour avoir toujours laissé ton bureau ouvert à un jeune doctorant plein de questionnements, et pour tout le temps passé à m'expliquer, me réexpliquer et parfois même à m'aider pour déboguer mes codes Python. Je n'oublierai pas toutes ces discussions passées dans ton bureau à essayer de démêler les conséquences de la courbe unique sur la sensibilité au choc ou à tenter d'analyser les résultats du détecteur de choc. Je te remercie Élodie de ton aide pour la génération de microstructures et pour avoir toujours été là pour répondre à mes questions au cours de mes (nombreuses) lectures de ta thèse. Merci également pour tes encouragements disposés subtilement dans mon bureau et pour m'avoir forcé à liquider mes missions. Je te remercie Maxime pour avoir essayé sans relâche (et sans grand succès, pour être honnête) de me faire aimer la rédaction. Merci également pour toutes ces tentatives pour comprendre comment reconstruire une interface avec la méthode de Youngs et pour ton soutien psychologique à grand coup de hanuta lors de la rédaction. Je suis désormais un peu plus proche du *confident* Jérôme. Enfin, merci à tous pour ces (très) nombreuses relectures de manuscrit, toujours réalisées dans la bonne humeur et dans l'enthousiasme (quoiqu'une légère fatigue se soit fait sentir au chapitre 4).

Bien que le départ de Gérard ait marqué la fin du trio magique [1, 2], un nouveau trio, tout aussi magique, semble s'être formé en les personnes de Marc, Elodie et Maxime.

J'aimerais maintenant remercier tous les collègues que j'ai eu la chance de côtoyer pendant ces trois années. Bien qu'ils aient parfois été « désagréables », les pauses café et déjeuner en leur compagnie auront largement contribué à ma bonne humeur quotidienne. Pour être sûr d'en oublier aucun, je vous propose de faire un petit tour des énergumènes qui peuplent ce laboratoire.

Tout d'abord, merci à Antoine GOSSET, *aka* le top 1, pour avoir réussi à me supporter comme co-bureau pendant près de 10 mois et pour m'avoir fait découvrir le double pschit à eau. Nos discussions avec Scott auront permis d'alléger considérablement la rédaction de ce manuscrit.

Merci à Maxime FAUVEL pour toutes ses anecdotes sur le mode de vie des rugbymen qui n'auront jamais manqué de me surprendre. Tu pourras mettre à jour ton pokédex : le Magicarpe est enfin devenu Léviathor. Fait tout de même attention à ne pas manger trop de kinder country ou tu risques de dépasser Moumou. Merci également à Samuel MOREIGNE, le spécialiste des murs de briques, pour ses montages de pères Noël. Par pitié, ne retourne pas la carte de La Réunion. Merci à Romain HUET pour son intérêt pour ma petite île dans nos discussions.

Passons maintenant au bureau le plus bruyant du labo. Merci à Léo SOBCZAK (le plus bruyant du bureau le plus bruyant) qui a su mettre à l'épreuve toute ma volonté avec ses propositions incessantes de pause-café. Merci à Mathieu MOZZARELLA (ou Moumou), dont le tintement de la tasse venait toujours annoncer le début d'une pause-café clandestine. Il aura fallu attendre la dernière semaine de ma dernière année de thèse pour qu'il accepte d'assister à l'une de mes présentations et qu'il découvre enfin ce qu'est réellement la courbe quasi-unique. J'espère te voir bientôt à La Réunion qui, d'après les rumeurs, est bien mieux que la Corse. Merci à Mathieu BALBARIE (je suis PILOTE!), dont la fragilité de la cheville est à la hauteur de ses qualités de bienfaiteur. J'espère que tu auras au moins autant apprécié ma présence ces trois années que le cadeau du père Noël secret.

Merci à Corentin DEREURE pour avoir gardé son calme malgré mes tentatives de vol de porte-manteau et pour tous ces débats marqués de mauvaise foi. Je ressorts de cette thèse avec une petite victoire personnelle : après trois années à essayer de goûter à ses cookies, j'aurais enfin réussi. Merci à Valentin LAVAUD, en qui j'aurais souvent cherché un soutien (quelle erreur!) pour me protéger des boutades de Corentin. Merci à Julien RANC pour avoir accepté d'assister aussi bien à ma soutenance qu'à ma répétition de soutenance. Je te souhaite bon courage pour supporter tes deux co-bureaux.

Merci à Pierre GRAUMER, qui râle aussi bien qu'il ne sait pas faire d'intégrales. Bien que ses encouragements parfois Douteux n'aient pas su me convaincre, je les garde en tête pour plus tard. J'attends ma plaque commémorative à l'entrée de ton garage. Merci à Laurent FIESCHI, l'expert en parade nuptiale animale et en imitation des chevreuils. Il y aurait beaucoup de choses à dire à son sujet mais je crains de manquer de place. Bref, je te souhaite tout le bonheur du monde avec Félicie. Merci à Vincent CHUZEVILLE, sans qui je n'aurais pas eu mon logement et sans qui j'aurais probablement raté ma Journée des Doctorants à l'ENSMA. Merci à Sébastien COURTIAUD, notre grand chef, pour avoir toujours su rester disponible malgré un emploi du temps excessivement chargé. Bien que toutes mes plaintes aient été redirigées vers le périphérique `dev/null`, je ne me fais pas trop de soucis quant à l'avenir du labo avec un chef pareil! Merci au maître du feu Maxime CHARRIER pour m'avoir fait découvrir la lutte turque et pour avoir été mon référent restaurant ces trois années. Tu noteras que j'ai choisi de laisser ta version de la figure 4.27 malgré son faible succès auprès de l'équipe encadrante. J'espère que tu en seras fier. Je remercie Alice CHAUVIN, à qui je souhaite bon courage pour supporter tous ces grands gaillards en pause-café. Je remercie Guillaume RAMBAUD, ancien maître du feu, à qui je souhaite de tout cœur de s'épanouir dans son nouveau poste.

Je tenais également à remercier mes encadrants, mais cette fois-ci en leur qualité de collègues. Je remercie tout d'abord Marc. Je n'aurais jamais pensé voir une personne rire autant à la seule prononciation du mot « dinosaure ». Je n'oublierais pas non plus cette dégustation de vétiver. Merci à Elodie, prix de thèse 2033^a, pour m'avoir fait découvrir son amour des autruches. Son intransigeance sur les cartes postales m'aura souvent permis de compléter mes petits-déjeuners. Enfin, je remercie Maxime pour son enthousiasme à apprendre de nouvelles expressions de « djeuns ». Ne vous fiez pas aux apparences, bien qu'il soit adepte de la ricorée, cet homme a frôlé le grand banditisme niçois.

Merci à Marie Christine pour ses visites régulières au bureau 90 ainsi que pour son enthousiasme à l'idée d'assister à ma soutenance. Merci à Clotaire pour avoir rajouté un peu de piment dans les repas d'un réunionnais loin de son île. Merci à Thibault PACCOU, Gabriel SEISSON, Marie ROMANN, Alice DELAUNAY et Émilien HAMON pour m'avoir accompagné à Chicago pour mon tout premier congrès. Merci à Théo BUSIER, mon premier co-bureau et expert-powerpoint, dont les présentations s'apparentent de plus en plus à une diffusion grand écran qu'à des diaporamas.

Je remercie Alice DELAUNAY (à nouveau) et Nicolas REBOUL pour toutes ces Journées Des Doctorants passés à l'ENSMA, et je leur souhaite bon courage pour la fin de leurs thèses. Je souhaite également un bon courage à Camille ROBIN pour la suite de sa thèse. Avec Élodie comme encadrante, je n'ai aucun doute quant à son issue.

Je remercie les Gladiateurs du causse et le Farang club pour m'avoir accueilli au cours de ces trois années à Gramat. Je remercie également tous les membres de la Compagnie Lotoise d'Improvisation Théâtrale pour m'avoir fait découvrir le théâtre d'improvisation, et tout particulièrement Coco, Emilie et Olivier, mes compagnons de covoiturage.

Merci à Jean BONNET et Candice VEYRES pour toutes ces soirées jeux et ces balades dans les Pyrénées en compagnie de Laurent. Je sais désormais que je suis susceptible de faire des crises de somnambulisme. Merci à Jean-Gabriel THIRIET pour toutes ces discussions, tous ces week-ends et toutes ces games. L'aventure aura été rude, mais elle touche à sa fin. Je te souhaite le meilleur pour cette fin de thèse et pour ton agrégation. Je remercie également mes amis de longue date : Alyson, Florian, Anthonin, Sib, Sévédé, Vinmani, Showy, Marion, Sara, Agnès, Simon et Adnane. J'en profite pour souhaiter un bon courage à Anthonin et Sévédé pour leur fin de thèse.

a. <https://www.youtube.com/watch?v=CN3cXG12vMc>

J'aimerais enfin remercier ma famille pour leur soutien sans failles. Merci à mon père et à ma mère qui auront su amener un jeune adolescent qui n'aimait pas travailler jusqu'au doctorat. Je remercie ma grande sœur bien aimée Emmanuelle, dite Manue, pour m'avoir supporté comme frère depuis maintenant 28 ans. Je remercie également ma petite sœur (elle aussi bien aimée) Manon, que l'on a dû supporter, Manue et moi, depuis maintenant 18 ans. Merci à mon beau-père, David, sa bonne humeur quotidienne et pour son humour dont je ne me lasse pas. Merci à tonton Marcel, tonton Jo, tatie Marie-Claude et à mon cousin Guillaume pour être venus lors de ma soutenance de thèse et pour cette semaine passée avec vous à Poitiers. Enfin, je ne saurais achever ces remerciements sans avoir une pensée pour mon ti kaf salon, Bertilus. Je ne manquerai pas de venir te voir à chacun de mes retours sur notre petite île.

Voilà.

Dr. Dr. Jérôme Saunier

PS : Au fait, avez-vous déjà entendu parler de la courbe unique ?

Table des matières

I	État de l'art	5
1	Théorie de la détonation	7
1.1	Généralités	7
1.2	Théorie classique de la détonation	10
1.2.1	La physique des chocs	10
1.2.2	Le modèle Chapman-Jouguet de la détonation	13
1.2.3	Le modèle ZND de la détonation	14
2	Transition du Choc à la Détonation	17
2.1	Théorie des points chauds	17
2.2	Les mécanismes d'apparition des points chauds	19
2.2.1	L'effondrement de pores	20
2.2.2	Les réflexions d'ondes	21
2.2.3	L'endommagement et la friction	22
2.2.4	Les bandes de cisaillement	22
2.2.5	Synthèse	23
2.3	Observation des points chauds	23
2.3.1	Points chauds dans un cristal	25
2.3.2	Points chauds dans une couche mince	27
2.3.3	Synthèse	31
3	Sensibilité d'un explosif	33
3.1	Le Pop-Plot	34
3.2	Notion de profondeur de transition	35
3.3	Représentation du Pop-Plot	40
3.4	Principe de courbe unique de transition	43
3.4.1	Incompatibilité du critère d'intersection des pentes avec l'hypothèse de courbe unique de transition	44
3.4.2	Interprétations théoriques et conséquences sur le Pop-Plot	45
3.4.3	Application au PBX-9501	54
3.5	Synthèse	60
4	Modélisation de la TCD	63
4.1	L'approche macroscopique	64
4.1.1	Modèles de première génération	65
4.1.2	Modèles de deuxième génération	66
4.1.3	Modèles de troisième génération	69
4.2	Vers des modèles de quatrième génération : l'approche mésoscopique	70
4.2.1	Les prémices	72
4.2.2	Étude des seuils d'amorçage	73
4.2.3	Étude de la TCD	88
4.3	Modèles hybrides	97
4.4	Synthèse	98
5	Positionnement de la thèse	101

II	Mise en place des simulations mésoscopiques	105
6	Génération de la microstructure	107
6.1	Modélisation de la microstructure de l'explosif	108
6.1.1	Tesselations de Voronoï et de Laguerre	108
6.1.2	Algorithmes de génération	109
6.2	Caractérisation de la microstructure	113
6.3	Maillage	114
6.4	Mesures de la granulométrie du HMX comprimé	115
7	Modélisation de la TCD	117
7.1	Configuration des simulations	118
7.2	Équations d'état	118
7.3	Modèle réactif employé	120
7.4	Implémentation du modèle réactif de régression de surface	122
7.4.1	Algorithme basé sur la méthode de Youngs	122
7.4.2	Algorithme basé sur la méthode de propagation de front d'onde	126
8	Validation du modèle réactif	135
8.1	Validation des modèles de régression de surface appliqués à un disque isolé	135
8.1.1	Algorithme basé sur la méthode d'Youngs	136
8.1.2	Algorithme basé sur la méthode de propagation de front d'onde	138
8.2	Comparaison des méthodes appliquées à un test du coin	139
8.3	Synthèse	144
9	Post-traitement	145
9.1	Extraction de la zone d'intérêt	145
9.2	Détermination des grandeurs moyennes	146
9.3	Distribution des grandeurs	148
9.4	Extraction du diagramme de marche	149
III	Simulations	151
10	Simulations réalisées à vitesse de déflagration constante	153
10.1	Phénoménologie des simulations	153
10.2	Influence de la vitesse de déflagration et de la microstructure	158
10.3	Courbe unique de transition	160
10.4	Relations d'équivalence entre microstructures	161
10.5	Comparaison des simulations mésoscopiques avec le Pop-Plot expérimental	163
10.6	Synthèse	164
11	Simulations avec une vitesse de déflagration dépendante de la pression	167
11.1	Simulations réalisées avec les données de la littérature	168
11.2	Phénoménologie observée dans les simulations	171
11.3	Détermination d'un premier jeu de paramètres pour la vitesse de déflagration du HMX	179
11.4	Passage à une microstructure représentative	184
11.5	Comparaison aux données expérimentales	186
11.6	Influence de la microstructure sur la TCD de l'explosif	189
11.7	Retour sur l'hypothèse de courbe unique	191
11.8	Synthèse	193
A	Critères de détection développés par le laboratoire de Georgia Tech	I
B	Microstructures employées dans la littérature	V
C	Influence de la méthode d'Youngs sur la vitesse du front de déflagration	XI
D	Étude de convergence en maillage	XV

Table des figures

1	Illustrations (a) de la détonation d'explosifs employés dans une carrière, issue de [3]; (b) d'une détonographie après coloration par encre, issue de [4]; (c) de pêcheurs tanzaniens employant des explosifs comme outils de pêche, issue de [5]; (d) d'une soudure entre une plaque de cuivre et une plaque d'acier réalisée par explosif, issue de [6].	1
1.1	Illustration de la combustion d'un matériau énergétique.	8
1.2	Illustration de la déflagration d'un matériau énergétique.	8
1.3	Illustration de la détonation d'un matériau énergétique.	9
1.4	Illustration de la propagation d'une onde de choc dans un matériau initialement au repos.	11
1.5	Représentation dans le diagramme (P, v) des états sous choc (1) et au repos (0) d'un matériau soumis à une onde de choc de célérité D	12
1.6	Schéma de principe du modèle de détonation de Chapman-Jouguet.	13
1.7	Représentation des états thermodynamiques atteints pour une onde de détonation dans un matériau initialement au repos dans le diagramme (P, v) , selon le formalisme de Chapman-Jouguet.	14
1.8	Schéma de principe du modèle de détonation de ZND.	15
1.9	Équations décrivant la détonation d'un matériau énergétique selon le formalisme ZND.	15
1.10	Représentation des états thermodynamiques atteints pour une onde de détonation dans un matériau initialement au repos dans le diagramme (P, v) , selon le formalisme ZND.	16
2.1	Illustration de la phénoménologie de la TCD pour un matériau homogène (a) et pour un matériau hétérogène (b), inspirée de [24].	18
2.2	Illustration de la microstructure d'un explosif à base de RDX et de cire issue de [27] (a) et de celle du PBX-9501, issue de [26] (b).	19
2.3	Illustration de l'effondrement d'un pore sous l'effet d'une onde de choc (tiré de [34]).	20
2.4	Illustration d'un pied de Mach adapté de [37] (a) et de l'élévation de la température le long des trajectoires des points triples, issu de [31] (b).	21
2.5	Illustration des mécanismes potentiels d'apparition de points chauds.	23
2.6	Illustration d'une couche mince [49] (gauche) d'un monocristal [9] (milieu) et d'un polycristal [9] (droite)	24
2.7	(a) Dispositif expérimental utilisé pour les expériences d'observation des points chauds du laboratoire Dlott [10]. Un dispositif similaire est employé dans travaux sur les couches minces [47]. (b) Grille multicible employée dans ces expériences, issue de [10]. (c) Monocristal isolé dans une matrice de liant, issue de [10].	25
2.8	Illustration de la combustion d'un monocristal de HMX pour un impact de plaque à 2500 m s^{-1} (gauche) à 2800 m s^{-1} (milieu) et à 3000 m s^{-1} (droite) [10].	26
2.9	Illustration de la présence de points chauds au niveau des défauts d'agrégats polycristallins de HMX (a,c) et de leur disparition (b,d) [9].	27
2.10	Evolution temporelle de la température des points chauds pour les compositions de X-PETN (a) de X-RDX (b) et de X-TNT (c) pour différentes vitesses d'impact [47].	28
2.11	Exemple d'un profil de radiance mesuré pour une couche mince à base de TATB et une vitesse d'impact de 1800 m s^{-1} (a) Illustration des mécanismes en jeu dans la couche mince lors de l'impact (b-e) issus de [50].	30

2.12	Illustration de la présence de points chauds dans une couche mince à base de HMX durant le premier pic de radiançe (voir figure 2.11.a) [51].	31
2.13	Illustration de la présence de points chauds dans une couche mince à base de HMX durant le second pic de radiançe (voir figure 2.11.a) [51].	31
3.1	Illustration du test du coin (a) et d'un Pop-Plot [54] (b).	35
3.2	Diagramme de marche du PBX-9501 issu de [55]. Les pentes correspondant au choc inerte et à la détonation établie sont tracées et leur intersection définit la profondeur de transition	36
3.3	Illustration des diagrammes de marche mesurés lors de tests du coin, issus de [55] (a) et des profils de vitesse de choc associés (b)	37
3.4	(a) Illustration du critère de transition basé sur une vitesse de référence à $0.99D_{CJ}$ (b) Illustration des incertitudes pouvant résulter de l'utilisation du critère de transition utilisant une vitesse de référence à $0.99D_{CJ}$. Une incertitude de 1% sur la vitesse de choc s'accompagne d'une incertitude de 1.2 mm sur la profondeur de transition.	38
3.5	Illustration du critère de transition associé à l'accélération maximale du choc.	39
3.6	Illustration de la forme complète d'un Pop-Plot. La portion rouge correspond à la plage de pression employée dans les Pop-Plot usuels, dans laquelle le Pop-Plot est assimilé à une droite.	42
3.7	Exemple de Pop-Plots pour des pressions faibles [77] (a), pour des pressions élevées [1] (b), obtenu dans le cadre de la courbe unique de transition [64] (c).	43
3.8	Illustration du principe de courbe unique formulé par Lindstrom [78] et appliqué aux trajectoires des ondes de choc. t^* représente le temps de transition à la détonation.	44
3.9	Diagrammes de marche obtenus pour quatre vitesses de choc initial D_0 allant de 4000 m s^{-1} à 5500 m s^{-1} tracés dans le référentiel du laboratoire (a) et dans le référentiel associé au critère de transition d'accélération maximale (b)	44
3.10	Illustration de la méthode d'intersection des pentes pour le diagramme de marche réalisé avec une vitesse de choc initial $D_0 = 4000 \text{ m s}^{-1}$ (a). Diagrammes de marche obtenus pour quatre vitesses de choc initial D_0 allant de 4000 m s^{-1} à 5500 m s^{-1} tracés dans le référentiel associé au critère de transition d'intersection des pentes (b).	45
3.11	Évolution spatiale de la vitesse du choc mesurée pour du PBX-9404 et tracée dans le repère de transition [79].	46
3.12	Schéma illustratif du principe de courbe unique de transition. Évolution spatiale de la vitesse de choc pour deux tests du coin (a) Recentrage des profils dans le référentiel de transition (b) La courbe unique obtenue permet d'accéder à l'ensemble des profils qui seraient obtenus avec un test du coin virtuel (c).	47
3.13	Schéma illustrant le passage de (a) la courbe unique dans le plan (x, D) à (b) la courbe unique dans le plan (x, P_c)	48
3.14	Illustration du passage du Pop-Plot expérimental du HMX comprimé (a) à la courbe d'évolution spatiale de la pression au choc (b), puis à la courbe d'évolution spatiale de la vitesse du choc (c).	49
3.15	Évolution de la vitesse de choc recentrée dans le référentiel associé au critère d'accélération maximale (a). Influence du critère de transition sur le Pop-Plot obtenu avec l'hypothèse de courbe unique (b). Zoom réalisé sur une gamme de pression usuelle (c).	50
3.16	Schéma illustratif de la limitation physique associée à la courbe unique de transition. Les signaux de pression associés à chaque temps sont également illustrés.	52
3.17	Schéma illustratif montrant l'évolution d'une onde de choc formée par un impact de plaque dans deux échantillons d'un même explosif. Dans le cas (A), l'onde de choc formée possède une vitesse initiale D_0 et atteint une vitesse D_3 au bout d'un temps t_3 . Dans le cas (B), l'onde de choc formée possède une vitesse initiale D_1 et atteint une vitesse D_3 au bout d'un temps $(\tilde{t}_3 - t_1)$. Les signaux de pression associés à chaque temps sont également illustrés.	53
3.18	Schéma illustrant l'évolution spatiale de la vitesse du choc si l'on suppose le principe de courbe unique de transition valide une fois la zone de réaction formée	54
3.19	Illustration de la non observation de la courbe unique par T. Elia <i>et al.</i> [81]	55

3.20	Régression du diagramme de marche expérimental réalisée à partir du tir numéro 1144 issu de [55].	56
3.21	Diagrammes de marche expérimentaux issus de [55] tracés dans le référentiel de transition (a) et évolution spatiale de la vitesse du choc dans ce même référentiel, déterminée à partir de la régression des différents diagrammes (b). La régression a été réalisée individuellement sur chacun des tirs.	57
3.22	Profils expérimentaux de l'évolution spatiale de la vitesse du choc issus de [55] et tracés dans le référentiel du laboratoire.	57
3.23	Diagrammes de marche expérimentaux issus de [55] tracés dans un référentiel arbitraire permettant d'observer l'existence d'une courbe unique (a). Évolution spatiale de la vitesse du choc tracée dans ce même référentiel (b).	58
3.24	Comparaison de la courbe unique obtenue à l'ensemble des diagrammes de marche expérimentaux issus de [55]. Les résidus associés à chaque tir sont représentés par les symboles triangulaires.	59
3.25	Schéma récapitulant les étapes nécessaires pour passer de la courbe unique de transition au Pop-Plot (a) et inversement (b).	61
4.1	Frise chronologique du développement des modèles de TCD pour les explosifs solides, issue de [1, 2] et complétée pour les besoins du manuscrit.	64
4.2	Schéma explicatif de la distinction entre approche macroscopique et approche mésoscopique.	70
4.3	Illustration des microstructures sphérique (a) et cubique (b) utilisées en compaction de poudre, et des microstructures sphérique (c), polyédrique inerte (d), et polyédrique réactive (e) utilisées en contexte de TCD par M.R. Baer [94]	73
4.4	Illustration des cartes de probabilité superposées sur des courbes Flux de puissance - Flux d'énergie (a) et Pression - Durée du choc (b) issues des travaux de Kim <i>et al.</i> [103]	76
4.5	Illustration des microstructures réalistes (a), à grains carrés (b), monomodale à grains sphériques (c) et bimodale à grains sphériques (d) pour une fraction volumique de grain de 0.69 utilisée par Barua <i>et al.</i> [97]. La microstructure (a) est ré-utilisée dans [97-99] et les microstructures (c) et (d) sont réutilisées dans [99].	76
4.6	Illustration des deux configurations employées par Barua <i>et al.</i> [99]. Les flèches et la couleur verte ont été ajoutées afin de souligner la méthode de génération de la microstructure.	78
4.7	Illustration d'une microstructure employée par Kim <i>et al.</i> [101]. Des microstructures similaires sont ré-utilisées par Wei <i>et al.</i> [106].	79
4.8	Illustration des microstructures employées par Kim <i>et al.</i> [102], pour différents diamètres de grains, avec un module de Young variable	80
4.9	(a) Illustration d'une microstructure générée par Kim <i>et al.</i> [103]. (b) Granulométrie moyenne des microstructures générées par Kim <i>et al.</i> [103].	81
4.10	Illustration des microstructures employées par Wei <i>et al.</i> [105]. Les microstructures sans défauts sont représentées en (a) et (d). Les microstructures avec de la décohé- sion entre les grains et le liant sont représentées en (b) et (c). Les microstructures avec des grains fissurés sont représentées en (e) et (f).	82
4.11	Illustration du champ de température obtenu par Wei [106] pour l'amorçage d'une microstructure avec une vitesse d'impact de 600 m s^{-1} et une durée de choc de (a) 112 ns et de (b) 114 ns.	83
4.12	Illustration d'une microtomographie du PBX9501 employée par Handley [30].	83
4.13	Illustration des trois configurations employées dans les travaux de Handley [30].	84
4.14	Illustration de coupes microtomographiques de RS-RDX (a), RVI-RDX (b) et de VI-RDX (c) employées par Kaeshammer [27].	85
4.15	Illustration des densités de probabilité de température en échelle linéaire (a) et logarithmique (b) obtenues par Kaeshammer [27]	86
4.16	Illustration du champ de fraction brûlée de HMX observé par Wang <i>et al.</i> dans la microstructure suite à un impact de 600 m s^{-1} [93].	87
4.17	Illustration des champs d'intensité de points chauds observés par Wei <i>et al.</i> [107] pour différents temps et différentes vitesses d'impact, dans une section d'une microstructure.	89
4.18	Illustration des configurations employées dans les travaux de Miller <i>et al.</i> [108].	89

4.19	Illustration de l'apparition d'une détonation en aval du front de choc dans les simulations réalisées par Miller <i>et al.</i> [108].	90
4.20	Illustration d'une microstructure (a) et d'une population de pores (b) issues des travaux de Coffelt <i>et al.</i> [120]. Les pores colorés en bleu sont situés dans le liant tandis que ceux colorés en rouge sont situés dans les cristaux énergétiques.	91
4.21	Illustration des configurations employées dans les travaux d'Olsen <i>et al.</i> [122].	92
4.22	Illustration des profils de vitesse de choc issus des simulations d'Olsen <i>et al.</i> [122].	93
4.23	Illustration des configurations étudiées dans les travaux de Choi <i>et al.</i>	94
4.24	Illustration du Pop-Plot obtenu par Choi <i>et al.</i> [123].	95
4.25	Illustration des configurations étudiées par Gallier [124] pour des échantillons de HMX comprimé (a) ainsi que des échantillons d'un explosif à base de HMX et de PBHT (b).	96
4.26	Illustration des configurations étudiées dans les travaux de Miller <i>et al.</i> [95].	97
4.27	Schéma récapitulatif de l'état de l'art réalisé pour l'approche mésoscopique.	99
5.1	(a) Pop-Plot du HMX comprimé issu des travaux de Gibbs et Popolato [128]; (b) vitesses de déflagration du HMX disponibles dans la littérature; (c) granulométrie du HMX comprimé issue des travaux de Burnside <i>et al.</i> [129].	103
6.1	Illustration de la chaîne de calcul mésoscopique développée au cours de la thèse.	108
6.2	Illustration de l'algorithme de germination-croissance employé pour générer des microstructures de HMX comprimé.	110
6.3	Schéma illustrant la cause des porosités induites par l'extraction des contours de la microstructure lors de la génération de la microstructure avec l'algorithme de germination-croissance.	110
6.4	Illustration des porosités induites par l'extraction des contours de la microstructure lors de la génération de la microstructure avec l'algorithme de germination-croissance.	111
6.5	Illustration de l'algorithme de génération de microstructure basé sur le calcul de distance.	111
6.6	Illustration d'une microstructure générée avec <i>Neper</i> [131].	112
6.7	Illustration de l'algorithme permettant d'obtenir une microstructure avec un taux de chargement $f_v = 0.9$ (droite) à partir d'une microstructure de HMX comprimé générée avec le logiciel <i>Neper</i> (gauche).	113
6.8	Propriétés morphologiques des microstructures générées dans le cadre de la thèse : (a) facteur de forme moyen; (b) surface moyenne; (c) diamètre équivalent moyen; (d) périmètre moyen.	114
6.9	Granulométries d'échantillons de HMX comprimé à plusieurs taux de chargement mesurées par Burnside <i>et al.</i> [129], sans utilisation d'un tamis vibrant (a) et avec utilisation d'un tamis vibrant (b), et par Bouchet [135] (c).	116
7.1	Schéma de principe du <i>test du coin</i>	118
7.2	Illustration du modèle réactif de régression de surface appliqué à un cristal idéalisé amorcé sur toute sa surface.	120
7.3	Graphique montrant l'évolution des vitesses de déflagration du HMX en fonction de la pression, tirés des travaux de Atwood <i>et al.</i> [140], Boggs <i>et al.</i> [16], Esposito <i>et al.</i> [17], et Zaug <i>et al.</i> [139].	121
7.4	Illustration de la méthode de Youngs appliquée à une maille mixte. À chaque frontière de la maille est attribuée une fraction volumique notée α	123
7.5	Illustration du procédé d'attribution d'identifiants aux grains de la microstructure : (a) Ensemble de grains polygonaux avec leurs germes, (b) Triangulation réalisée sur les germes des grains, (c) Attribution des identifiants aux germes, (d) Attribution des identifiants aux grains à partir de l'identifiant de leurs germes.	125
7.6	Illustration d'une microstructure après attribution des identifiants par groupe.	125
7.7	Illustration du calcul des temps d'arrivée pour une maille quadrilatérale en vue directe du point d'amorçage.	127
7.8	Illustration du calcul des distances d'arrivée pour une maille quadrilatérale en vue directe du point d'amorçage.	129
7.9	Illustration d'un cas problématique dans la définition d'une distance entre un point d'amorçage noté P et un point M pour un milieu non connexe.	130

7.10	Illustration de la méthodologie employée lors de la projection des distances aux contours des grains du maillage lagrangien sur la grille eulérienne employée pour les simulations numériques.	130
7.11	Illustration du biais engendré par la présence d'éléments triangulaires dont les trois nœuds sont situés sur le contour d'un grain.	131
7.12	Illustration du biais engendré par l'absence du point le plus éloigné du contour du grain dans le maillage lagrangien lors du calcul des distances aux contours.	132
7.13	Schéma de principe du squelette morphologique d'un polygone inspiré des travaux d'Attali [148].	133
8.1	Cas de validation d'un grain de HMX isolé dans un liant. La configuration est bidimensionnelle et le grain est représenté par un disque.	136
8.2	Illustration de la forme du front de déflagration reconstruit par l'algorithme basé sur la méthode d'Youngs à différents instants, pour quatre valeurs de λ_{seuil}	137
8.3	Évolution temporelle du rayon équivalent du grain obtenue lors du cas de validation avec l'algorithme basé sur la méthode d'Youngs pour quatre valeurs de λ_{seuil}	138
8.4	Illustration de la forme du front de déflagration reconstruit par l'algorithme basé sur la méthode de propagation de front d'onde à différents instants.	139
8.5	Évolution temporelle du rayon équivalent du grain obtenu lors du cas de validation avec l'algorithme basé sur la méthode de propagation de front d'onde.	139
8.6	Illustration des champs de fraction brûlée obtenus à deux instants lors des simulations numériques de test du coin pour l'algorithme basé sur la méthode de Youngs (a) et celui basé sur la méthode de propagation de front d'onde (b). La vitesse de déflagration employée est constante et égale à $D_f = 200 \text{ m s}^{-1}$	140
8.7	(a) Exemple de deux grains voisins dont la frontière verticale est susceptible d'engendrer des retards d'amorçage des réactions lors d'une simulation numérique. Une ligne de profil passant par cette frontière est représentée. (b) Illustration des effets de l'advection sur la grandeur d_{min} sur la ligne de profil tracée en (a).	141
8.8	Évolution spatiale de la vitesse du choc obtenue lors des simulations numériques de test du coin pour les deux algorithmes de reconstruction du front de déflagration. La vitesse de déflagration employée est constante et égale à $D_f = 200 \text{ m s}^{-1}$	142
8.9	Évolution spatiale de la vitesse du choc obtenue lors des simulations numériques de test du coin pour les deux algorithmes de reconstruction du front de déflagration. Les paramètres employés pour la vitesse de déflagration sont $b = 200 \text{ m s}^{-1}$ et $n = 1.4$	142
8.10	Illustration des champs de fraction brûlée obtenus à deux instants lors des simulations numériques de test du coin pour l'algorithme basé sur la méthode de Youngs (a) et celui basé sur la méthode de propagation de front d'onde (b). Les paramètres employés pour la vitesse de déflagration sont $b = 200 \text{ m s}^{-1}$ et $n = 1.4$	143
9.1	Illustration du champ de vitesse matérielle dans la direction \vec{y} obtenu dans les simulations à trois instants. Les zones d'intérêt extraites sont délimitées par les cadres en pointillés rouges.	146
9.2	Comparaison des profils moyens de pression obtenus selon l'opérateur de moyenne employé. La simulation exploitée a été réalisée avec une microstructure de diamètre équivalent moyen $\overline{d_{eq}} = 162 \mu\text{m}$, une vitesse de déflagration $D_f = 1000 \text{ m s}^{-1}$ et avec une vitesse d'impact $v_i = 832 \text{ m s}^{-1}$	147
9.3	(a) Carte de couleur représentant l'évolution de la distribution de pression en fonction de la position, à un instant fixé. À position x et pression P données, la carte de couleur indique la fréquence à laquelle la pression P apparaît dans les mailles situées à la position x . (b) Évolution spatiale de la pression moyenne (pour une moyenne arithmétique) et de son intervalle de confiance. La simulation exploitée a été réalisée avec une microstructure de diamètre équivalent moyen $\overline{d_{eq}} = 162 \mu\text{m}$, une vitesse de déflagration $D_f = 1000 \text{ m s}^{-1}$ et avec une vitesse d'impact $v_i = 832 \text{ m s}^{-1}$	148

9.4	Illustration (a) du diagramme de marche et (b) de l'évolution spatiale de la vitesse de choc obtenus à l'issue d'une simulation. La simulation exploitée a été réalisée avec une microstructure de diamètre équivalent moyen $\overline{d_{eq}} = 162 \mu\text{m}$, une vitesse de déflagration $D_f = 100 \text{ m s}^{-1}$ et avec une vitesse d'impact $v_i = 832 \text{ m s}^{-1}$	149
10.1	Illustration du champ de fraction brûlée à proximité de l'onde de choc, pour une simulation réalisée avec une vitesse de déflagration $D_f = 100 \text{ m s}^{-1}$	154
10.2	Évolution spatiale de la pression moyenne et de son intervalle de confiance à différents instants. La microstructure a un diamètre équivalent moyen de $\overline{d_{eq}} = 162 \mu\text{m}$ et une vitesse de déflagration $D_f = 100 \text{ m s}^{-1}$ est employée. La vitesse d'impact est de $v_i = 800 \text{ m s}^{-1}$	155
10.3	Évolution spatiale de la vitesse du choc lors de la TCD, pour une microstructure avec un diamètre équivalent moyen de $\overline{d_{eq}} = 162 \mu\text{m}$ et une vitesse de déflagration $D_f = 100 \text{ m s}^{-1}$. La vitesse d'impact est de $v_i = 800 \text{ m s}^{-1}$. Les temps choisis pour la figure 10.2 sont notés.	156
10.4	Illustration du champ de fraction brûlée à proximité de l'onde de choc, pour une simulation réalisée avec une vitesse de déflagration $D_f = 1000 \text{ m s}^{-1}$	156
10.5	Évolution spatiale de la pression moyenne et de son intervalle de confiance à différents instants. La microstructure a un diamètre équivalent moyen de $\overline{d_{eq}} = 162 \mu\text{m}$ et une vitesse de déflagration $D_f = 1000 \text{ m s}^{-1}$ est employée. La vitesse d'impact est de $v_i = 800 \text{ m s}^{-1}$	157
10.6	Évolution spatiale de la vitesse du choc lors de la TCD, pour une microstructure avec un diamètre équivalent moyen de $\overline{d_{eq}} = 162 \mu\text{m}$ et une vitesse de déflagration $D_f = 1000 \text{ m s}^{-1}$. La vitesse d'impact est de $v_i = 800 \text{ m s}^{-1}$. Les temps choisis pour la figure 10.5 sont notés.	158
10.7	Évolution spatiale de la vitesse du choc obtenue par simulation pour différentes vitesses de déflagration avec une vitesse d'impact $v_i = 800 \text{ m s}^{-1}$ et une microstructure de diamètre équivalent moyen $\overline{d_{eq}} = 162 \mu\text{m}$	159
10.8	Évolution spatiale de la vitesse du choc pour différentes microstructures à $v_i = 800 \text{ m s}^{-1}$ pour deux vitesses de déflagration : $D_f = 100 \text{ m s}^{-1}$ (carrées) et $D_f = 1000 \text{ m s}^{-1}$ (disques)	160
10.9	Évolution spatiale de la vitesse du choc à différentes vitesses d'impact pour des vitesses de déflagration $D_f = 100 \text{ m s}^{-1}$ (gauche) et $D_f = 1000 \text{ m s}^{-1}$ (droite). Les profils sont obtenus pour une microstructure de diamètre moyen $\overline{d_{eq}} = 162 \mu\text{m}$ et sont recalés arbitrairement afin que $D(x = 0 \text{ mm}) = 8000 \text{ m s}^{-1}$	161
10.10	Évolution spatiale de la vitesse du choc pour trois microstructures pour des vitesses de déflagration constantes. La microstructure à $162 \mu\text{m}$ a été prise comme référence pour déterminer la vitesse de déflagration des deux autres microstructures.	162
10.11	Comparaison de l'évolution spatiale de la vitesse du choc pour différentes microstructures à $v_i = 800 \text{ m s}^{-1}$ pour deux vitesses de déflagration : $D_f = 100 \text{ m s}^{-1}$ (carrés) et $D_f = 1000 \text{ m s}^{-1}$ (disques) avec le Pop-Plot expérimental du HMX comprimé [128].	163
11.1	Illustration des régressions réalisées à partir des mesures de vitesse de déflagration disponibles dans la littérature.	169
11.2	Évolution spatiale de la vitesse du choc obtenue pour des simulations réalisées avec des jeux de paramètres issus de la littérature pour la loi de vitesse de déflagration.	170
11.3	Évolution de la vitesse de déflagration en fonction de la pression pour les jeux de paramètres $b = 200 \text{ m s}^{-1}$, $n = 1.2$ et $b = 2300 \text{ m s}^{-1}$, $n = 3.5$. Les données expérimentales étant tridimensionnelles, celles-ci ont été adaptées à une configuration 2D avec la relation 11.5.	171
11.4	Évolution de la vitesse de déflagration en fonction de la pression pour les jeux de paramètres $b = 200 \text{ m s}^{-1}$, $n = 1.2$ et $b = 2300 \text{ m s}^{-1}$, $n = 3.5$ après adaptation à une configuration 3D avec la relation 11.5.	172

11.5	Illustration du champ de fraction brûlée et de l'évolution spatiale de la fraction brûlée moyenne dans une zone de 3 mm×3 mm derrière le front de choc à différents instants. La simulation est réalisée avec une vitesse d'impact $v_i = 800 \text{ m s}^{-1}$ et une microstructure ayant un diamètre équivalent moyen $\overline{d_{eq}} = 162 \mu\text{m}$. Une vitesse de déflagration dépendante de la pression est employée avec un paramètre $b = 200 \text{ m s}^{-1}$ et un coefficient $n = 1.2$	173
11.6	Évolution spatiale de la pression moyenne et de son intervalle de confiance à différents instants. Une microstructure avec un diamètre équivalent moyen de $\overline{d_{eq}} = 162 \mu\text{m}$ est employée ainsi qu'une vitesse d'impact de $v_i = 800 \text{ m s}^{-1}$. Une vitesse de déflagration dépendante de la pression est utilisée avec un paramètre $b = 200 \text{ m s}^{-1}$ et un coefficient $n = 1.2$	174
11.7	Évolution spatiale de la vitesse du choc lors de la TCD, pour une vitesse d'impact de $v_i = 800 \text{ m s}^{-1}$ et une microstructure avec un diamètre équivalent moyen de $\overline{d_{eq}} = 162 \mu\text{m}$. Une vitesse de déflagration dépendante de la pression est employée, avec un paramètre $b = 200 \text{ m s}^{-1}$ et un coefficient $n = 1.2$. Les temps issus de la figure 11.6 sont notés.	175
11.8	Illustration du champ de fraction brûlée et de l'évolution spatiale de la fraction brûlée moyenne dans une zone de 3 mm×3 mm derrière le front de choc à différents instants. La simulation est réalisée avec une vitesse d'impact $v_i = 800 \text{ m s}^{-1}$ et une microstructure ayant un diamètre équivalent moyen $\overline{d_{eq}} = 162 \mu\text{m}$. Une vitesse de déflagration dépendante de la pression est employée avec un paramètre $b = 2300 \text{ m s}^{-1}$ et un coefficient $n = 3.5$	176
11.9	Illustration du champ de fraction brûlée à différents instants dans la zone d'intérêt du coin. La simulation est réalisée avec une vitesse d'impact $v_i = 800 \text{ m s}^{-1}$ et une microstructure ayant un diamètre équivalent moyen $\overline{d_{eq}} = 162 \mu\text{m}$. Une vitesse de déflagration dépendante de la pression est employée avec un paramètre $b = 2300 \text{ m s}^{-1}$ et un coefficient $n = 3.5$	177
11.10	Évolution spatiale de la pression moyenne et de son intervalle de confiance à différents instants. Les profils de fraction brûlée moyenne sont également tracés. Une microstructure avec un diamètre équivalent moyen de $\overline{d_{eq}} = 162 \mu\text{m}$ est employée ainsi qu'une vitesse d'impact de $v_i = 800 \text{ m s}^{-1}$. Une vitesse de déflagration dépendante de la pression est utilisée avec un paramètre $b = 2300 \text{ m s}^{-1}$ et un coefficient $n = 3.5$	178
11.11	Évolution spatiale de la vitesse du choc lors de la TCD pour une vitesse d'impact de $v_i = 800 \text{ m s}^{-1}$ et une microstructure avec un diamètre équivalent moyen de $\overline{d_{eq}} = 162 \mu\text{m}$. Une vitesse de déflagration dépendante de la pression est employée, avec un paramètre $b = 2300 \text{ m s}^{-1}$ et un coefficient $n = 3.5$. Les temps issus de la figure 11.10 sont notés.	179
11.12	(a) Influence du paramètre b sur la loi de vitesse de déflagration; (b) Influence du coefficient n sur la loi de vitesse de déflagration; (c) Prévision des évolutions spatiales de la vitesse du choc obtenue avec les jeux de paramètres issus de (a); (d) Prévision des évolutions spatiales de la vitesse du choc obtenue avec les jeux de paramètres issus de (b).	180
11.13	Influence du coefficient n de la loi de vitesse de déflagration sur l'évolution spatiale de la vitesse du choc, pour quatre valeurs du paramètre b . Les profils sont tracés pour une microstructure à $\overline{d_{eq}} = 162 \mu\text{m}$ et une vitesse d'impact de 800 m s^{-1}	181
11.14	Influence du paramètre b de la vitesse de déflagration sur l'évolution spatiale de la vitesse du choc, pour quatre valeurs du coefficient n . Les profils sont tracés pour une microstructure à $\overline{d_{eq}} = 162 \mu\text{m}$ et une vitesse d'impact de 800 m s^{-1}	182
11.15	Comparaison de l'évolution spatiale de la vitesse du choc, obtenue pour un coefficient $n = 3.5$ et un paramètre $b = 2300 \text{ m s}^{-1}$, au Pop-Plot expérimental du HMX comprimé tracé dans le plan (x, D) sous l'hypothèse de la courbe unique de transition.	183
11.16	Évolution spatiale de la vitesse du choc pour trois microstructures pour des vitesses de déflagration dépendantes de la pression. La microstructure à $\overline{d_{eq}} = 162 \mu\text{m}$ a été prise comme référence pour déterminer les paramètres de la loi de la vitesse de déflagration des deux autres microstructures.	185

11.17	Comparaison de l'évolution spatiale de la vitesse du choc obtenue pour des microstructures de diamètre moyen $\overline{d_{eq}} = 162 \mu\text{m}$ et $\overline{d_{eq}} = 49 \mu\text{m}$. La microstructure $\overline{d_{eq}} = 162 \mu\text{m}$ a été utilisée comme référence, et les paramètres de la vitesse de déflagration de la microstructure $\overline{d_{eq}} = 49 \mu\text{m}$ ont ensuite été déterminés avec les relations d'équivalence 11.7 et 11.8.	186
11.18	Comparaison de la vitesse de déflagration obtenue <i>via</i> la calibration aux mesures disponibles dans la littérature.	187
11.19	Évolution de la proportion de surface réactive qui serait nécessaire à la restitution du Pop-Plot du HMX comprimé, sous l'hypothèse que les données issues de Boggs <i>et al.</i> [16] et Atwood <i>et al.</i> [140] sont généralisables aux pressions caractéristiques de la TCD. Cette proportion est exprimée par rapport à une microstructure de diamètre équivalent moyen $\overline{d_{eq}} = 48.8 \mu\text{m}$	189
11.20	Évolutions spatiale de la vitesse du choc moyenne et de son intervalle de confiance obtenues pour cent microstructures.	190
11.21	Influence de la vitesse d'impact sur l'évolution spatiale de la vitesse du choc pour trois valeurs du coefficient n . Les profils ont été recalés dans le référentiel tel que $D(x = 0 \text{ mm}) = 8000 \text{ m s}^{-1}$. La microstructure employée a un diamètre équivalent moyen de $\overline{d_{eq}} = 162 \mu\text{m}$	191
11.22	Influence de la vitesse d'impact sur l'évolution spatiale de la vitesse du choc. Les profils ont été recalés dans le référentiel tel que $D(x = 0 \text{ mm}) = 6000 \text{ m s}^{-1}$. La microstructure employée a un diamètre équivalent moyen de $\overline{d_{eq}} = 48.8 \mu\text{m}$	192
11.23	Illustration de la stratégie envisagée pour le couple HMX/Viton.	199
11.24	Diagramme (P, v) élaboré avec le détecteur de choc (a) à partir des profils moyens des grandeurs thermodynamiques pour plusieurs instants d'une simulation, (b) à partir des champs des grandeurs thermodynamiques à un instant donné d'une simulation, (c) à partir des champs des grandeurs thermodynamiques pour plusieurs instants de la simulation.	201
A.1	Schéma de principe du critère de la "loupe" développé par Barua <i>et al.</i> [98].	II
A.2	Schéma de principe du critère de la RDF issue de Barua <i>et al.</i> [100].	II
C.1	Schéma de principe pour la configuration étudiée. (a) À l'état initial, le HMX est au repos et les réactions sont amorcées à son extrémité gauche. (b) Le front de déflagration issu de cet amorçage se propage ensuite à vitesse constante D_f	XI
C.2	Schéma illustrant le processus de propagation du front de déflagration dans un cas unidimensionnel pour un nombre de mailles $N = 6$. La fraction brûlée seuil λ_{seuil} est ici choisie telle que $3\lambda_{\text{seuil}} > 1$	XII
C.3	Cas particulier dans l'algorithme basé sur la méthode d'Youngs pouvant être rencontré lors de la combustion d'un grain sphérique.	XIII
D.1	Influence du maillage sur l'évolution spatiale de la vitesse de choc pour une vitesse d'impact de 800 m s^{-1} (a) et de 1000 m s^{-1} (b). La microstructure employée possède un diamètre équivalent moyen de $162 \mu\text{m}$	XV

Liste des tableaux

1.1	Caractéristiques détoniques des cristaux d'explosifs fréquemment employés dans les explosifs secondaires militaires, tirées de [12].	9
7.1	Tableau récapitulatif des paramètres employés dans les équations d'état de Cochran-Chan.	119
7.2	Tableau récapitulatif des paramètres employés dans l'équation d'état JWL.	119

8.1	Tableau récapitulant les temps de combustion obtenus avec l'algorithme basé sur la méthode d'Youngs lors du cas de validation pour quatre valeurs de λ_{seuil}	138
11.1	Paramètres pour la vitesse de déflagration du HMX obtenus <i>via</i> la régression des données de la littérature, après adaptation pour des configurations 2D.	169
11.2	Jeux de paramètres pour la loi de vitesse de déflagration obtenus <i>via</i> les relations d'équivalence. La microstructure numérotée 1 est prise comme microstructure de référence.	185
11.3	Propriétés morphologiques des cent microstructures équivalentes générées.	190
B.1	Microstructures artificielles employées dans la littérature (partie 1).	VI
B.2	Microstructures artificielles employées dans la littérature (partie 2).	VII
B.3	Microstructures artificielles employées dans la littérature (partie 3).	VIII
B.4	Microstructures issues de microtomographies employées dans la littérature (partie 1).	IX
B.5	Microstructures issues de microtomographies employées dans la littérature (partie 3).	X

Introduction

Les explosifs sont employés aussi bien dans des applications civiles que militaires. Dans le domaine civil, ils sont notamment utilisés dans l'ingénierie industrielle pour souder des plaques de métal (soudage par explosif) ou dans les carrières où ils représentent une solution économique pour fragmenter les roches (figures 1.a et 1.d). Des pratiques plus insolites ont également vu le jour avec la détonographie (impression par explosif) ou la pêche à la dynamite^b (figures 1.b et 1.c). Dans le domaine militaire, dans lequel s'inscrit cette thèse, les explosifs sont employés dans les grenades, les obus mais aussi dans certains blindages de véhicules (blindages dits réactifs).

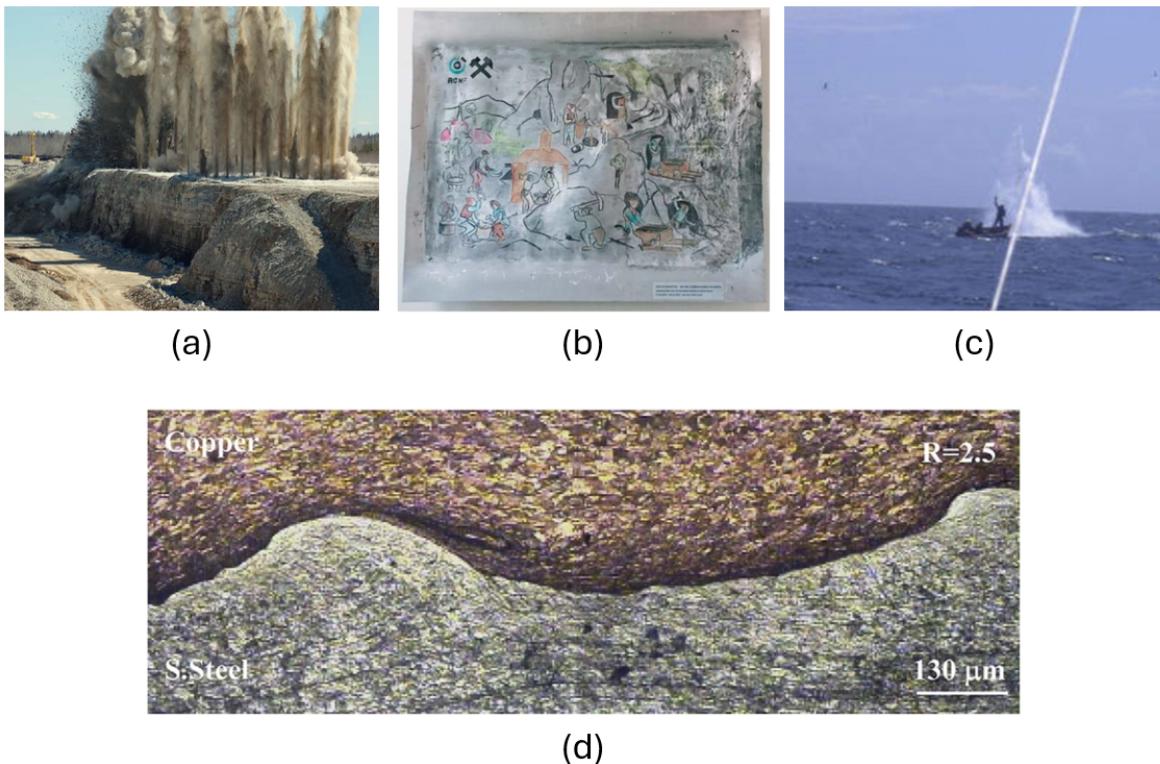


FIGURE 1 – Illustrations (a) de la détonation d'explosifs employés dans une carrière, issue de [3]; (b) d'une détonographie après coloration par encre, issue de [4]; (c) de pêcheurs tanzaniens employant des explosifs comme outils de pêche, issue de [5]; (d) d'une soudure entre une plaque de cuivre et une plaque d'acier réalisée par explosif, issue de [6].

Du fait des risques associés à leur décomposition, les explosifs doivent être caractérisés par des essais stricts avant d'être employés. Cette caractérisation est nécessaire à des fins de sécurité, afin d'éviter les détonations accidentelles, mais également afin de quantifier leurs performances. La sensibilité d'un explosif, soit sa propension à entrer en régime de détonation, doit donc être déterminée pour différents types de sollicitations : choc, échauffement lent ou rapide, friction, électricité statique, etc. La sensibilité au choc est un des aspects importants de la caractérisation des compositions explosives. En effet, dans un grand nombre d'applications, leur mise en détonation (ou amorçage) est réalisée par une onde de choc. La compréhension des mécanismes responsables

b. La pêche à la dynamite est interdite en France depuis 1891.

de la mise en détonation de l'explosif suite à la propagation d'un choc est notamment essentielle pour maîtriser l'amorçage des munitions. Traditionnellement, l'onde de choc est générée par un détonateur. Elle est ensuite transmise à l'explosif d'intérêt et assure sa détonation. Dans ce contexte, l'évolution d'un choc en détonation est qualifiée de transition choc-détonation (TCD).

Les explosifs solides possèdent, pour la plupart, une structure hétérogène appelée microstructure et composée de cristaux énergétiques enrobés d'un liant qui assure la tenue mécanique du mélange [7]. Lorsqu'ils sont soumis à une onde de choc, l'échauffement induit est hétérogène et génère des élévations de température locales à l'échelle de la microstructure. Ces échauffements locaux peuvent déclencher l'apparition de réactions chimiques, ou points chauds, qui vont contribuer à la mise en détonation de l'explosif.

Bien que la théorie des points chauds ait été formulée depuis la fin des années 40 [8], les mécanismes responsables de leur formation sont encore globalement mal compris et demeurent encore aujourd'hui un domaine de recherche actif. Du fait des échelles spatiales (μm) et temporelles ($\text{ns} - \mu\text{s}$) associées à la formation des points chauds [9], l'observation directe de ces phénomènes est longtemps restée inaccessible. Cependant, de nouvelles études expérimentales permettent maintenant leur observation dans des microstructures simplifiées (cristaux isolés, échantillons de faibles dimensions, etc.). Parmi ces études, les travaux expérimentaux de Johnson *et al.* [9, 10] suggèrent que les points chauds se développent en surface des cristaux énergétiques et ces derniers sont ensuite consumés par un front de déflagration.

À l'heure actuelle, les modèles réactifs employés pour décrire la TCD sont majoritairement basés sur une approche macroscopique [11] et empirique. Les explosifs sont modélisés comme des matériaux homogènes et les caractéristiques de la microstructure ne transparaissent que par le biais de paramètres numériques ajustables dans la cinétique de l'explosif. En pratique, ces paramètres doivent être calibrés afin de restituer les données expérimentales. Avec l'augmentation des puissances de calcul, l'approche mésoscopique (à l'échelle de la microstructure) connaît un essor grandissant. Elle consiste à modéliser explicitement l'interaction de l'onde de choc avec la microstructure et a pour objectif de développer des modèles réactifs prédictifs de la TCD. Ainsi, la calibration des modèles macroscopiques pourra être réalisée *via* une approche numérique, à partir de simulations réalisées à l'échelle mésoscopique. L'approche mésoscopique devrait également ouvrir de nouvelles perspectives dans la conception de systèmes d'arme *via* une approche *in silico*. En effet, la modélisation explicite de la microstructure devrait permettre d'explorer l'influence des paramètres microstructuraux (granulométrie, porosité, etc.) sur la TCD, ce qui est inaccessible avec une modélisation macroscopique de l'explosif.

L'objectif à long terme de ces travaux de thèse est de permettre la prédiction de la sensibilité au choc d'une composition énergétique à partir de simulations numériques réactives à l'échelle mésoscopique et d'en déduire un modèle macroscopique de TCD utilisable à grande échelle (au sens géométrique). L'approche mésoscopique devrait également participer à mieux comprendre les mécanismes en jeu lors de l'amorçage des explosifs.

Dans ce contexte, cette thèse propose un modèle réactif de régression de surface à l'échelle mésoscopique. Le choix de ce modèle réactif a été réalisé au regard des travaux expérimentaux de Johnson *et al.* [9, 10] mentionnés ci-dessus. L'objectif de cette thèse est donc d'étudier la viabilité d'un tel modèle réactif. Pour cela, des simulations eulériennes ont été réalisées à l'échelle mésoscopique afin d'étudier la TCD du HMX comprimé. Le choix de ce matériau a été fait pour permettre la comparaison des résultats obtenus aux données expérimentales disponibles dans la littérature.

Organisation du manuscrit

Ce manuscrit est segmenté en trois grandes parties, chacune subdivisée en plusieurs chapitres.

La première partie est un état de l'art comportant cinq chapitres. Le premier chapitre introduit les notions fondamentales liées au phénomène de détonation et nécessaires à la compréhension de ce manuscrit. Le deuxième chapitre aborde la notion de Transition Choc-Détonation et des mécanismes responsables de l'apparition des points chauds. Une attention particulière est portée sur une série d'études expérimentales qui suggèrent que les cristaux énergétiques des explosifs sont amorcés à leur surface et se consomment ensuite selon un mécanisme de régression de surface. Le troisième chapitre présente la notion de sensibilité au choc des explosifs. Le Pop-Plot y est introduit ainsi que l'hypothèse de courbe unique de transition. Ce chapitre fait l'objet d'une réflexion menée sur ces deux sujets. Dans ce contexte, des données expérimentales de la littérature ont été ré-exploitées afin d'illustrer les problématiques liées à la vérification de l'existence d'une courbe unique de transition. Le quatrième chapitre se focalise sur la modélisation de la TCD. Les modèles macroscopiques y sont introduits et l'approche mésoscopique, en pleine émergence, est ensuite détaillée. Deux courants d'études sont abordés : l'un portant sur les mécanismes d'apparition des points chauds, l'autre sur la transition du choc en détonation. Le cinquième chapitre a pour vocation de recentrer la thèse dans le cadre de cet état de l'art.

La seconde partie détaille les outils développés afin de permettre la réalisation des simulations mésoscopiques avec un modèle réactif de régression de surface. Le sixième chapitre porte sur les méthodes de génération de microstructure. Le septième chapitre présente le code de calcul OURANOS et la configuration des simulations réalisées. Le modèle réactif de régression de surface n'étant pas présent nativement dans le code OURANOS, deux algorithmes ont été développés et implémentés. Ils sont également détaillés dans ce chapitre. Le huitième chapitre présente les travaux réalisés pour valider ces deux algorithmes. Le neuvième chapitre introduit les outils de post-traitement développés.

Enfin, la dernière partie présente les résultats de ces simulations et est constituée de deux chapitres. Le dixième chapitre se focalise sur les simulations réalisées avec une vitesse de déflagration constante. Cette approche simplifiée permet de déterminer si le modèle réactif implémenté est apte à modéliser une transition du choc en détonation. Le onzième chapitre présente les résultats des simulations réalisées avec une vitesse de déflagration dépendante de la pression, plus représentative de la physique des explosifs.

Première partie

État de l'art

Théorie de la détonation

Sommaire

1.1	Généralités	7
1.2	Théorie classique de la détonation	10
1.2.1	La physique des chocs	10
1.2.2	Le modèle Chapman-Jouguet de la détonation	13
1.2.3	Le modèle ZND de la détonation	14

1.1 Généralités

Les matériaux énergétiques sont des matériaux capables de libérer une quantité importante d'énergie, stockée sous forme chimique, en un temps très court [12]. Lors de leur décomposition, l'énergie stockée est libérée par le biais d'une réaction exothermique d'oxydo-réduction. Cette décomposition peut se faire selon trois régimes :

1. Le régime de combustion qui se propage par conduction thermique et qui transforme les réactifs en produits sous forme de gaz chauds. L'interface entre les réactifs et les produits est communément appelée la flamme [13]. C'est un phénomène lent, dont la vitesse de propagation est pilotée par la conduction thermique et très faible devant la vitesse du son dans le milieu. De ce fait, le phénomène de combustion n'est pas associé à une augmentation de la pression. L'ordre de grandeur de la vitesse de combustion est comprise entre le mm s^{-1} et le m s^{-1} [12]. La zone de réaction associée à une combustion est très fine, inférieure au millimètre. Une illustration de ce régime de décomposition est présentée en figure 1.1.

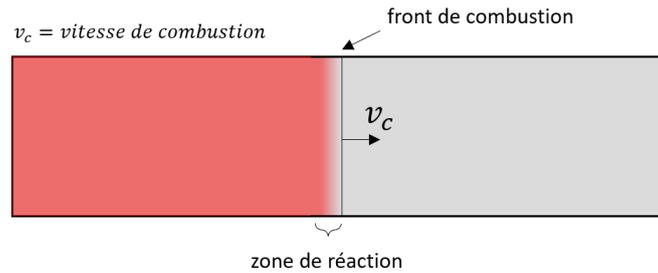


FIGURE 1.1 – Illustration de la combustion d'un matériau énergétique.

2. Le régime de déflagration est souvent dépeint comme un régime particulier de combustion, où les réactions chimiques induisent la formation d'ondes de compression. La déflagration est ainsi composée d'un train d'ondes de compression suivi d'un front réactif. La vitesse de propagation de la déflagration correspond alors à la somme de la vitesse du front de réaction et de la vitesse de déplacement des réactifs [13]. Bien qu'un ordre de grandeur d'une centaine de m s^{-1} soit mentionné dans certains ouvrages [7, 14], le terme de "vitesse de déflagration" est parfois employé pour des vitesses de l'ordre du m s^{-1} ou de la dizaine de m s^{-1} [15-17]. La vitesse de l'onde réactive est subsonique par rapport au milieu dans lequel elle se propage. Lorsque l'onde de déflagration atteint la frontière entre le matériau énergétique et l'air ambiant, une onde de pression est induite dans l'air [14]. Comme nous le verrons dans les chapitres suivants, la déflagration joue un rôle fondamental dans la Transition Choc-Détonation (TCD) des explosifs solides hétérogènes. Une illustration de ce régime de décomposition est présentée en figure 1.2.

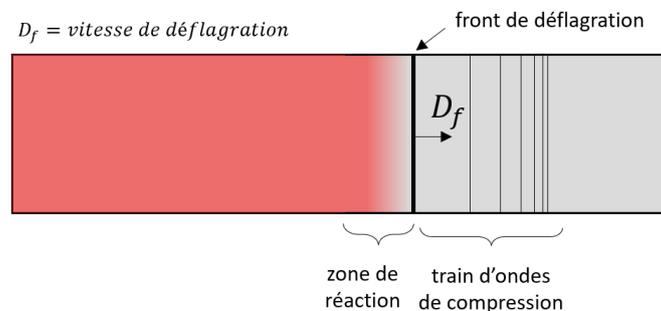


FIGURE 1.2 – Illustration de la déflagration d'un matériau énergétique.

3. Le régime de détonation est un régime de décomposition caractérisé par une onde de choc suivie de réactions chimiques au sein du matériau énergétique. L'onde de choc se propage avec une vitesse supersonique dans le milieu [14]. Lors de la détonation, les réactions chimiques sont induites par le passage de l'onde de choc et fournissent au choc l'énergie nécessaire à sa propagation. L'écoulement est supersonique dans la zone de réaction et sonique sur la surface marquant la fin de la zone de réaction. La zone de réaction est donc isolée des perturbations avales du milieu. On parle alors de frontière sonique. Une illustration de ce régime de décomposition est présentée en figure 1.3.

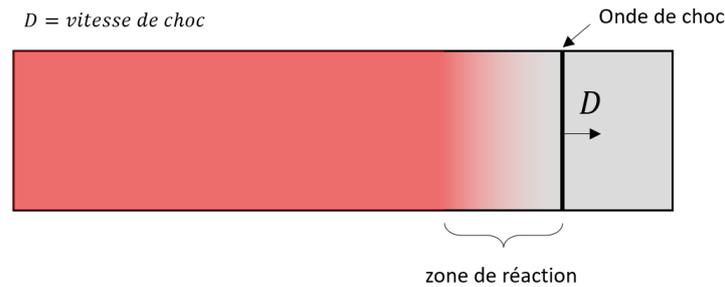


FIGURE 1.3 – Illustration de la détonation d'un matériau énergétique.

Ces trois régimes ne sont pas complètement indépendants et des transitions sont possibles [12]. En effet, la combustion d'un matériau énergétique peut évoluer en déflagration pour ensuite transiter en détonation, ou inversement.

Les matériaux énergétiques peuvent être catégorisés en quatre groupes : les poudres, les propergols, les compositions pyrotechniques et les explosifs. Les poudres et les propergols ont pour fonction principale la propulsion et leur régime nominal est la combustion et la déflagration [12]. Les compositions pyrotechniques sont employées pour produire une grande variété d'effets, tels que la production de bruit, de chaleur, de lumière, etc. Les explosifs, quant à eux, sont employés pour leur capacité à détoner. Ces derniers constituent notre objet d'étude.

Les explosifs peuvent être classés en deux catégories : les explosifs primaires et secondaires. Les explosifs primaires sont très sensibles aux agressions extérieures et se décomposent uniquement selon un régime de détonation. Ils sont employés dans les détonateurs pour l'amorçage des explosifs secondaires [14]. Les explosifs secondaires, quant à eux, peuvent se décomposer suivant les trois régimes décrits précédemment. Ils sont généralement amorcés *via* une onde de choc, d'où l'importance d'étudier le phénomène de TCD.

Les explosifs secondaires sont généralement constitués de cristaux énergétiques, responsables des effets recherchés lors de la détonation, et d'un liant assurant la tenue mécanique de la composition. Le tableau 1.1 récapitule les cristaux énergétiques les plus fréquemment rencontrés dans les explosifs secondaires militaires ainsi que leurs caractéristiques détoniques.

TABLE 1.1 – Caractéristiques détoniques des cristaux d'explosifs fréquemment employés dans les explosifs secondaires militaires, tirées de [12].

Explosif	Masse volumique (kg m^{-3})	Vitesse de détonation (m s^{-1})	Pression de détonation (GPa)
HMX	1900	9260	39.7
RDX	1810	8920	35.7
TATB	1940	8390	31.8

Selon leur mode de fabrication, on distingue trois grandes familles d'explosifs :

- les explosifs comprimés qui sont généralement fabriqués en enrobant les cristaux énergétiques avec une fine couche de liant ^a [12]. Ils sont ensuite comprimés afin de souder les grains entre eux. Cela permet d'avoir des explosifs avec un taux de chargement important. Il s'agit généralement de compositions très performantes mais relativement coûteuses [18]. Ces explosifs ont généralement une porosité importante.
- les explosifs composites sont dérivés des propergols composites et sont constitués de cristaux énergétiques mélangés dans un liant qui est ensuite polymérisé [12]. Le taux de liant de ces compositions est plus important que celui des explosifs comprimés en raison des contraintes rhéologiques liées au malaxage. Il est généralement compris entre 10 à 20%.
- les explosifs coulés-fondus sont basés sur un liant fusible mélangé à des cristaux énergétiques et sont mis en oeuvre par coulée [12]. Le TNT est parfois employé comme liant pour de meilleures performances. Les taux de chargement obtenus peuvent être importants, atteignant 90% de cristaux énergétiques et 10% de liant.

Dans ce mémoire, nous traiterons uniquement de la détonation des explosifs. Plus précisément, nous nous focaliserons sur la Transition Choc-Détonation des explosifs, qui sera abordée dans le chapitre suivant.

1.2 Théorie classique de la détonation

Avant d'étudier la Transition Choc-Détonation d'un explosif, les théories classiques liées à la physique des ondes de choc et de la détonation sont introduites. L'objectif de cette section est de définir les éléments théoriques qui seront employés tout au long de ce manuscrit. Cette partie n'est qu'une introduction aux théories classiques de la détonation. Le lecteur trouvera des présentations plus complètes dans les ouvrages de Thevenin [14], Kubota [15], Lee [13].

1.2.1 La physique des chocs

Une onde de choc est une discontinuité thermodynamique et mécanique qui se propage dans un milieu à une vitesse plus élevée que la vitesse du son [14]. Lors de sa propagation dans un matériau, celui-ci passe instantanément d'un état initial à un état dit "sous choc" (voir figure 1.4).

a. Certains explosifs comprimés ne possèdent pas de liant : on parle alors de poudre comprimés.

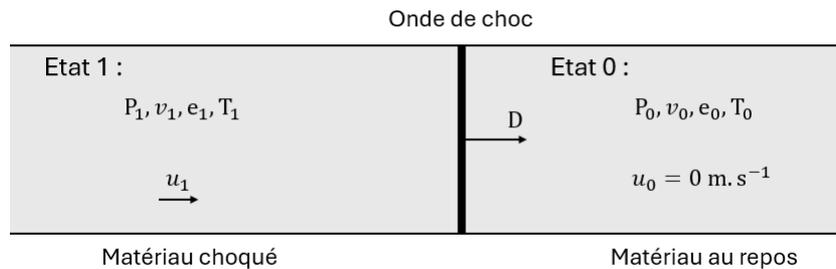


FIGURE 1.4 – Illustration de la propagation d’une onde de choc dans un matériau initialement au repos.

Pour un choc plan, les caractéristiques de l’écoulement en aval de l’onde de choc sont déterminées à l’aide des relations de conservation, exprimées ci-dessous en géométrie monodimensionnelle :

$$\rho_0 D = \rho_1 (D - u_1) \quad (\text{Conservation de la masse}) \quad (1.1a)$$

$$P_1 - P_0 = \rho_0 D u_1 \quad (\text{Conservation de la quantité de mouvement}) \quad (1.1b)$$

$$e_1 - e_0 = \frac{1}{2} (P_1 + P_0) (v_0 - v_1) \quad (\text{Conservation de l’énergie}) \quad (1.1c)$$

où ρ est la masse volumique, D la vitesse de l’onde de choc, u la vitesse matérielle, P la pression, $v = \frac{1}{\rho}$ le volume spécifique, et e l’énergie interne massique. L’indice 0 représente l’état initial du matériau et l’indice 1 l’état sous choc.

Ces équations sont également appelées Relations de Rankine-Hugoniot. Dans le cas des solides, il conviendrait de remplacer la pression P par la contrainte σ_{xx} [15]. Pour des chocs forts ou des matériaux possédant une limite élastique relativement faible (comme les matériaux énergétiques), le déviateur des contraintes peut néanmoins être négligé devant la pression hydrostatique.

Le système formé par ces trois équations présente cinq inconnues et n’est, par conséquent, pas fermé. Pour déterminer les caractéristiques de l’écoulement en aval du choc, il est nécessaire de disposer d’une relation de fermeture. Cette fermeture est obtenue à travers l’équation d’état (EOS) du matériau, qui consiste à relier les grandeurs thermodynamiques d’un matériau entre elles :

$$F(P, v, e) = 0 \quad (1.2)$$

Pour une vitesse de choc donnée, il devient alors possible de déterminer les caractéristiques du matériau sous choc. En combinant les équations 1.1a et 1.1b, on obtient l'équation de la droite de Rayleigh, reliant l'état initial du matériau et son état sous choc :

$$P_1 - P_0 = -\rho_0^2 D^2 (v_1 - v_0) \quad (1.3)$$

Dans le diagramme (P, v) , la droite de Rayleigh a une pente égale à $-(\rho_0 D)^2$, $\rho_0 D$ correspondant au débit de masse à travers l'onde de choc.

En combinant l'équation d'état avec l'équation 1.1c, on obtient la courbe d'Hugoniot $P = f(v)$, correspondant à l'ensemble des points (P, v) atteignables au passage d'une onde de choc. À noter que l'Hugoniot ne décrit pas des états successifs comme le ferait un chemin thermodynamique.

Dans le diagramme (P, v) , il est possible de déterminer l'état sous choc à partir de l'état initial du matériau, de l'Hugoniot et de la droite de Rayleigh. Cette représentation est illustrée en figure 1.5.

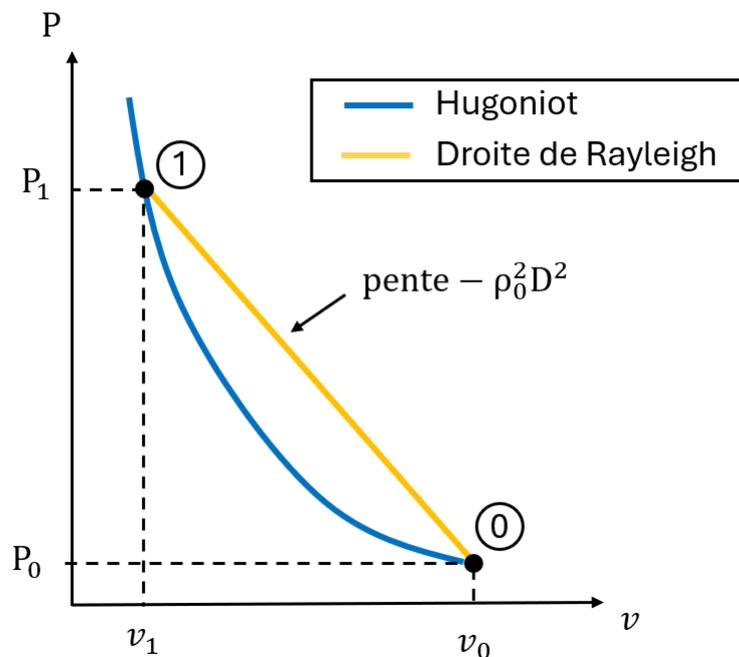


FIGURE 1.5 – Représentation dans le diagramme (P, v) des états sous choc (1) et au repos (0) d'un matériau soumis à une onde de choc de célérité D .

Dans la pratique, l'Hugoniot est parfois présentée sous la forme $D = f(u)$. Cette relation se révèle pratique étant donné que de nombreux matériaux vérifient la relation empirique [15] :

$$D = c_0 + s u_1 \quad (1.4)$$

où c_0 est la vitesse du son du milieu au repos, et s un paramètre caractéristique du matériau, traduisant sa compressibilité.

Lorsque l'Hugoniot est tracée dans le plan (P, u) , on parle de polaire de choc.

1.2.2 Le modèle Chapman-Jouguet de la détonation

Le modèle de détonation de Chapman-Jouguet (CJ) consiste à représenter l'onde de détonation comme une onde de choc réactive infiniment mince [19, 20]. La vitesse de réaction est infiniment grande et les réactifs se transforment instantanément en produits de détonation après le passage de l'onde de choc. La vitesse de l'onde de détonation est appelée vitesse de Chapman-Jouguet D_{CJ} , et est constante pour un matériau donné. Dans le modèle de détonation de Chapman-Jouguet, l'onde de détonation est sonique par rapport au milieu aval ($D_{CJ} = u_{CJ} + c_{CJ}$). Une illustration de ce modèle est représentée en figure 1.6.

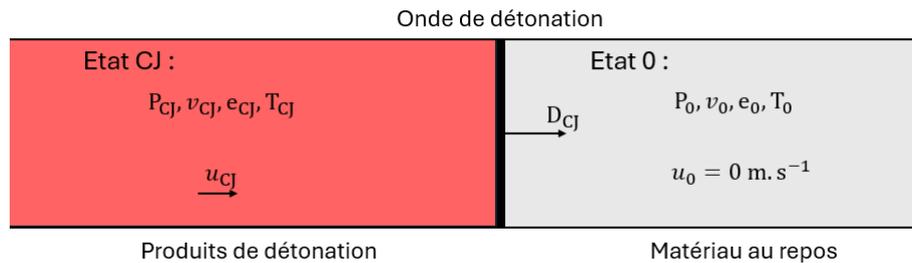


FIGURE 1.6 – Schéma de principe du modèle de détonation de Chapman-Jouguet.

Au travers de l'onde de choc réactive, l'équation 1.1c devient :

$$e_1^{produits} - e_0^{réactifs} = \frac{1}{2}(P_{CJ} + P_0)(v_{CJ} - v_0) \quad (1.5)$$

avec $e_1^{produits}$ l'énergie interne des produits de détonation à la pression P et au volume spécifique v et $e_0^{réactifs}$ l'énergie interne des réactifs dans l'état 0.

Les produits de détonation et les réactifs ont chacun leur propre équation d'état, contrairement au cas inerte de la section 1.2.1. Les produits de détonation sont dans un état d'équilibre thermochimique.

La représentation de l'équation 1.5 dans le diagramme (P, v) s'appelle la courbe de Crussard (ou Hugoniot réactive) et correspond à tous les états pouvant être atteints par les produits de détonation à partir de l'état initial (P_0, v_0) des réactifs.

Dans le plan (P, v) , le modèle CJ relie un état 0 (matériau au repos) situé sur l'Hugoniot du matériau, à l'état CJ situé sur l'Hugoniot des produits de détonation. Ces deux états sont reliés par la droite de Rayleigh, tangente à la courbe de Crussard. L'état CJ correspond à l'état stable de détonation.

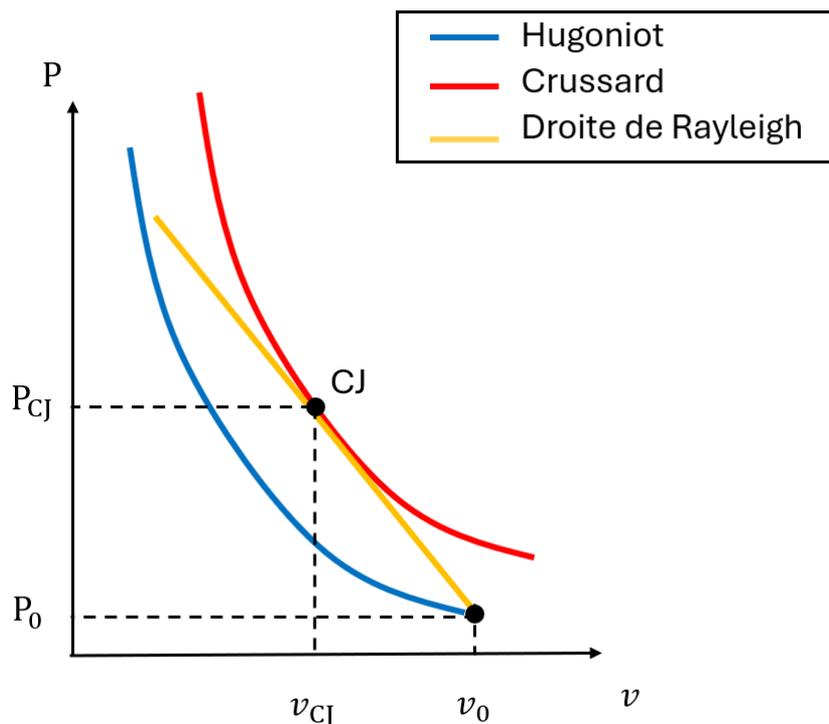


FIGURE 1.7 – Représentation des états thermodynamiques atteints pour une onde de détonation dans un matériau initialement au repos dans le diagramme (P, v) , selon le formalisme de Chapman-Jouguet.

1.2.3 Le modèle ZND de la détonation

Le modèle de détonation de Zeldovich, von Neumann et Döring (ZND) est une généralisation du modèle CJ dans lequel le taux de réaction infini est remplacé par un taux de réaction fini. L'onde de détonation est donc modélisée comme une onde de choc inerte couplée à une zone de réaction d'épaisseur finie [21-23]. L'état induit par le choc inerte est appelé état de von Neumann (vN). Dans le cas d'une onde de détonation stationnaire plane, la fin de la zone de réaction correspond à un état où les produits de détonation sont dans l'état CJ. L'onde de détonation correspond alors à une onde de choc inerte, de vitesse constante D_{CJ} , suivie d'une zone de réaction isolée du milieu aval par une frontière sonique. Ce modèle est illustré en figure 1.8.

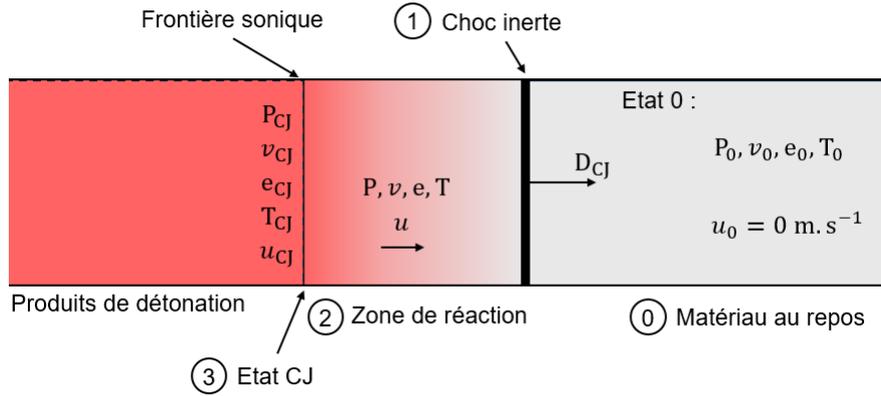


FIGURE 1.8 – Schéma de principe du modèle de détonation de ZND.

Dans le cas d'une chimie globale à une étape, une nouvelle équation décrivant la transformation des réactifs en produits de détonation dans la zone de réaction est introduite :

$$\frac{\partial(\rho\lambda)}{\partial t} + \nabla(\rho\lambda)u = \rho R \quad (1.6)$$

avec R le taux de réaction, et $\lambda \in [0, 1]$ l'avancement de la réaction.

Le formalisme ZND regroupe alors les équations présentées en figure 1.9.

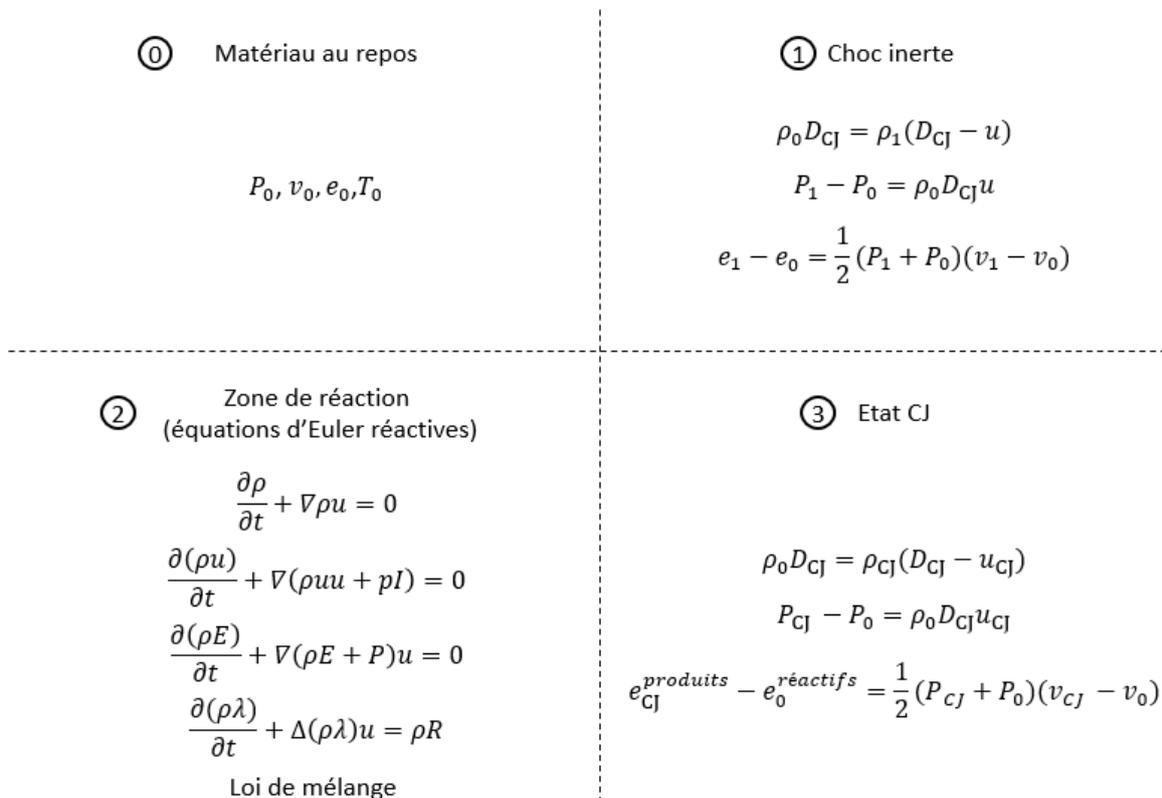


FIGURE 1.9 – Équations décrivant la détonation d'un matériau énergétique selon le formalisme ZND.

Dans le diagramme (P, v) , le choc inerte du modèle ZND, appelé pic de von Neuman, se traduit le passage d'un état (P_0, v_0) , à l'état de von Neumann (P_{vN}, v_{vN}) sur l'Hugoniot de l'explosif non réagi. Après le choc inerte, l'explosif solide se décompose en produits de détonation. Cette décomposition s'accompagne d'une détente des produits de détonation, ce qui se traduit par un passage de l'état de von Neumann à l'état CJ le long de l'isentrope. À la fin de la zone de réaction, les produits de détonation sont dans l'état CJ. Dans le cas d'une onde stationnaire, le débit de masse est constant en tout état de l'écoulement dans le repère lié au front de détonation. Par conséquent, le point associé à l'état de von Neumann, le point CJ et le point (P_0, v_0) sont alignés avec la droite de Rayleigh.

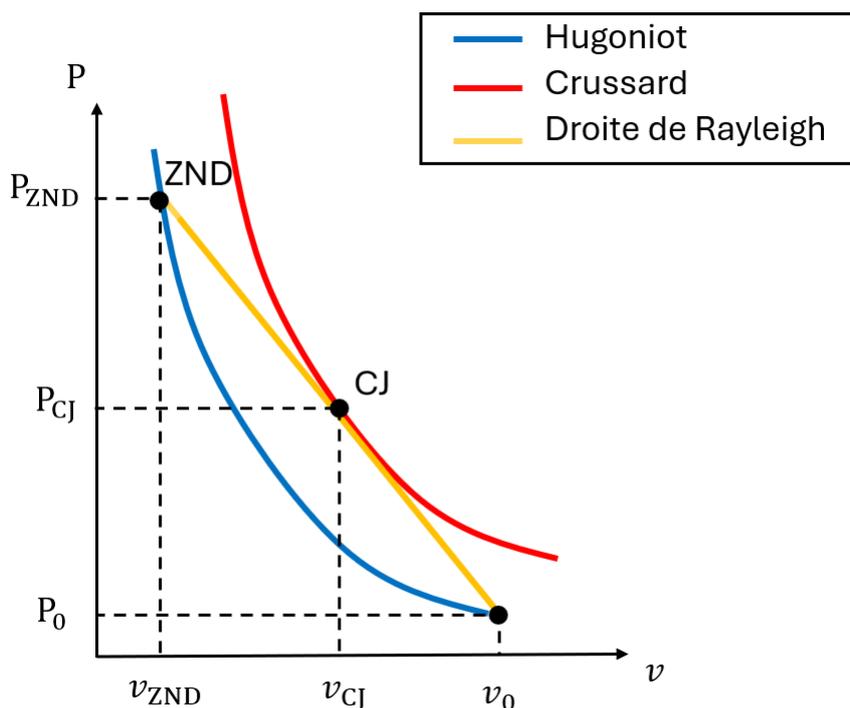


FIGURE 1.10 – Représentation des états thermodynamiques atteints pour une onde de détonation dans un matériau initialement au repos dans le diagramme (P, v) , selon le formalisme ZND.

Le modèle ZND permet de traiter des configurations plus complexes que le modèle CJ. Il permet notamment le traitement des ondes de détonation courbes ou des phénomènes non stationnaires comme la TCD des explosifs.

Transition du Choc à la Détonation

Sommaire

2.1	Théorie des points chauds	17
2.2	Les mécanismes d'apparition des points chauds	19
2.2.1	L'effondrement de pores	20
2.2.2	Les réflexions d'ondes	21
2.2.3	L'endommagement et la friction	22
2.2.4	Les bandes de cisaillement	22
2.2.5	Synthèse	23
2.3	Observation des points chauds	23
2.3.1	Points chauds dans un cristal	25
2.3.2	Points chauds dans une couche mince	27
2.3.3	Synthèse	31

Lorsqu'une onde de choc est générée dans l'explosif par un système extérieur, tel qu'un impact, elle peut engendrer l'apparition de réactions chimiques qui, sous certaines conditions, peuvent mener au régime de détonation. On parle alors d'amorçage par choc, ou de Transition Choc-Détonation (TCD). Ce phénomène intervient notamment dans l'amorçage des munitions, qui s'appuie souvent sur un système d'amorçage par choc (détonateur, slapper, etc.). Il est donc particulièrement important à modéliser afin d'assurer et de maîtriser l'amorçage des compositions explosives.

2.1 Théorie des points chauds

Les explosifs existent sous différentes formes : solide, liquide, ou gazeuse. On distingue généralement les explosifs homogènes (liquides, gaz), et les explosifs hétérogènes (explosifs solides) qui possèdent des mécanismes d'amorçage par choc différents [24].

Dans le cas des explosifs homogènes, les réactions chimiques apparaissent en aval de l'onde de choc incidente après un temps d'induction [24]. Suite à ces réactions, une onde réactive se propage et s'intensifie jusqu'à rattraper le front de choc incident. Cette onde est qualifiée de "super-détonation" et possède une vitesse plus importante que la vitesse de détonation de Chapman-Jouguet [24]. Après avoir rattrapé l'onde de choc incidente, elle se relaxera vers l'état de détonation stationnaire CJ.

Pour des explosifs solides hétérogènes, la phénoménologie observée diffère. Les réactions chimiques sont principalement localisées à proximité du front de choc incident et accélèrent le choc de façon continue jusqu'à atteindre l'état de détonation établie [1]. Les trajectoires des ondes induites lors d'un amorçage par choc dans un explosif homogène et hétérogène en écoulement monodimensionnel sont illustrées en figure 2.1. De tels graphiques, représentant l'évolution de la position en fonction du temps, sont appelés des diagrammes de marche.

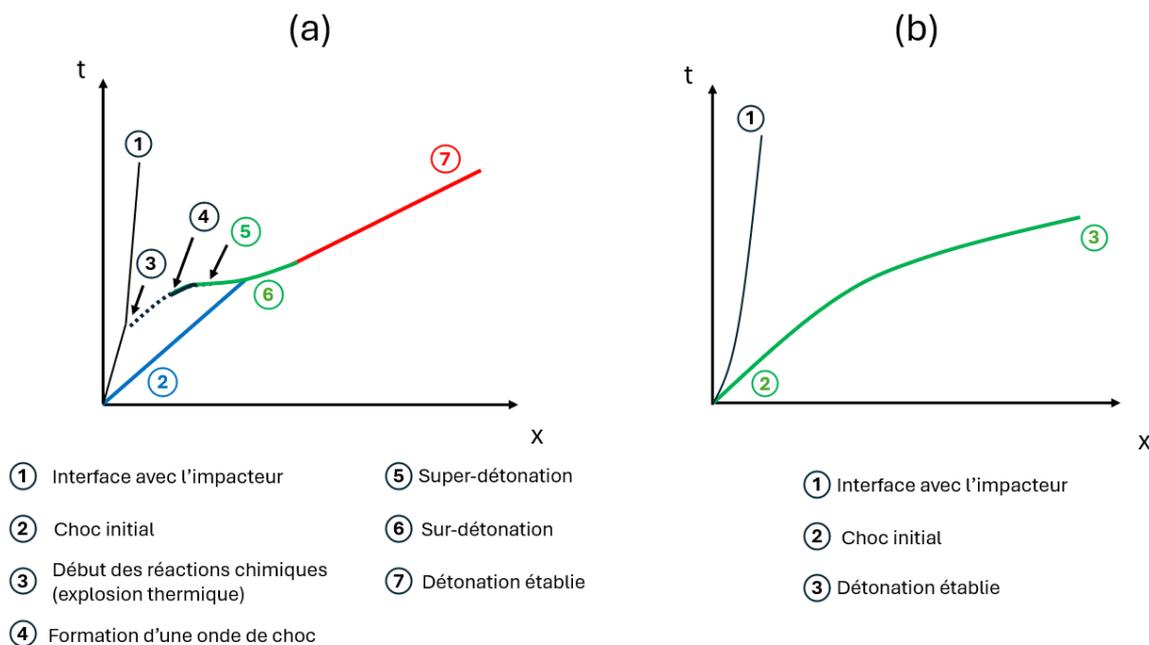


FIGURE 2.1 – Illustration de la phénoménologie de la TCD pour un matériau homogène (a) et pour un matériau hétérogène (b), inspirée de [24].

Pour représenter l'amorçage par choc des explosifs, Hubbard et Johnson [25] modélisent les réactions chimiques de l'explosif par une loi d'Arrhénius. Cependant, si le caractère inductif observé lors de l'amorçage des explosifs homogènes est correctement restitué, elle ne permet pas de modéliser le comportement des explosifs solides. En effet, contrairement aux explosifs homogènes, les explosifs solides sont généralement constitués de cristaux mélangés dans un liant viscoplastique. Sur la figure 2.2, deux exemples de structures hétérogènes, aussi appelées microstructures, d'explosifs solides sont illustrés. L'explosif à base de RDX est un coulé-fondu. Il présente une proportion de cristaux énergétiques, aussi appelée taux de charges, assez faible (environ 55% en volume). Les cristaux présentent peu de défauts internes. En revanche, le PBX 9501, en tant qu'explosif comprimé, est très chargé (seulement 7,3 % de liant en volume) et il est difficile de distinguer le liant des cristaux les plus fins, dont le diamètre est de l'ordre du micromètre [26]. Les cristaux présentent de nombreuses fissures, résultant probablement de la compression nécessaire à sa fabrication.

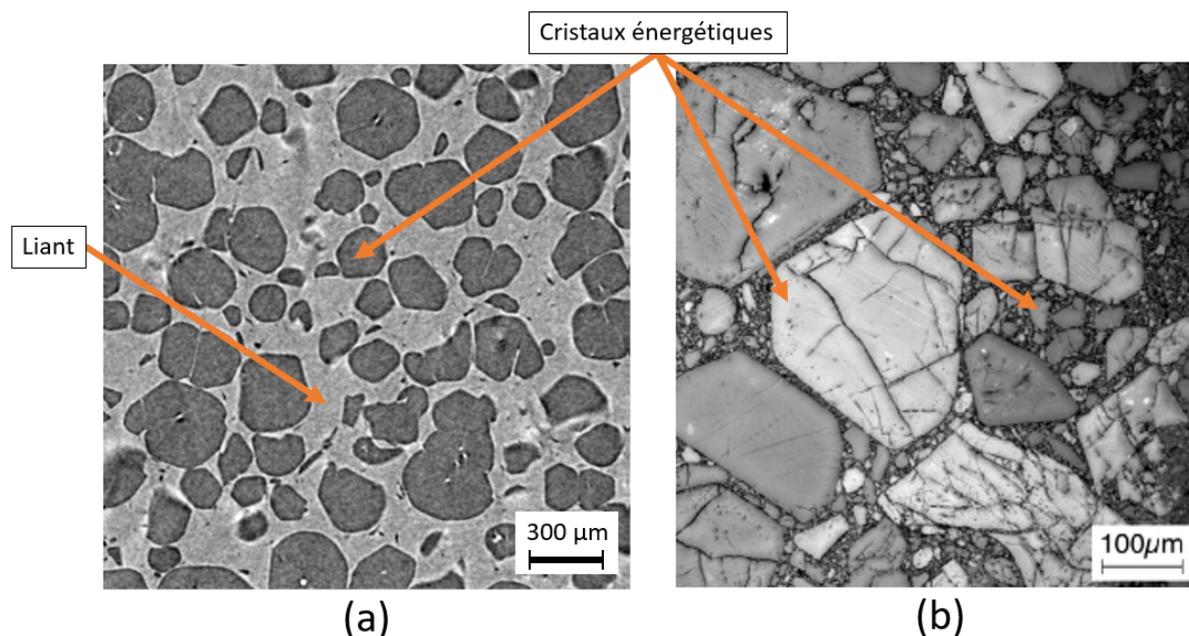


FIGURE 2.2 – Illustration de la microstructure d'un explosif à base de RDX et de cire issue de [27] (a) et de celle du PBX-9501, issue de [26] (b).

En 1952, Bowden et Yoffe [28] mettent en évidence la présence de sites préférentiels d'amorçage des réactions chimiques, appelés points chauds, dans les explosifs hétérogènes à l'échelle de la microstructure. Cette observation permet notamment d'expliquer pourquoi des impacts mécaniques de faible amplitude peuvent amorcer des explosifs hétérogènes, alors que l'élévation de température moyenne induite par le choc n'est que de quelques degrés [29]. Ainsi, le passage d'une onde de choc dans un matériau énergétique hétérogène induit une température plus élevée au niveau de ces sites d'amorçage que dans le reste de l'explosif [7] et y favorise l'apparition des réactions chimiques. Les réactions chimiques issues de ces sites préférentiels vont ensuite se propager au sein du matériau *via* un régime de déflagrations locales, jusqu'à coalescence des fronts de déflagration. Ces déflagrations locales génèrent des ondes de compression qui finiront par rattraper le front de choc incident, entraînant son accélération [11]. L'amplitude de l'onde de choc augmente alors, accroissant la pression de choc et la réactivité des points chauds, jusqu'à la transition vers une onde de détonation [30].

2.2 Les mécanismes d'apparition des points chauds

Bien que la théorie des points chauds ait été énoncée dans les années 50, leur formation est encore mal comprise [31], et il n'y a actuellement pas consensus concernant les mécanismes responsables de leur apparition [11, 29]. Malgré tout, un certain nombre d'entre eux a déjà été identifiés [32] et est détaillé ci-dessous.

2.2.1 L'effondrement de pores

Les explosifs solides présentent un certain nombre de défauts dans leurs microstructures qui peuvent être source d'apparition de points chauds [7, 11]. En particulier, la présence de porosités peut être responsable de l'apparition de points chauds. Les pores se présentent généralement comme des cavités occluses remplies d'air ou de solvants situées dans les cristaux énergétiques [33]. Leur taille est de l'ordre du micromètre.

Suite au passage d'une onde de choc, la face avant du pore se déforme et engendre ainsi un jet de matière [34]. Cette déformation s'accompagne d'une élévation de température locale par dissipation visqueuse et plastique [7]. Le jet de matière va ensuite impacter la face arrière du pore, générant ainsi des températures élevées [34]. Pour un pore cylindrique, l'impact du jet sur la face arrière forme deux lobes de gaz qui vont s'effondrer provoquant une augmentation supplémentaire de la température [34]. Une illustration de l'effondrement d'un pore est présentée sur la figure 2.3. C'est un mécanisme reconnu comme étant important pour l'apparition de points chauds [35].

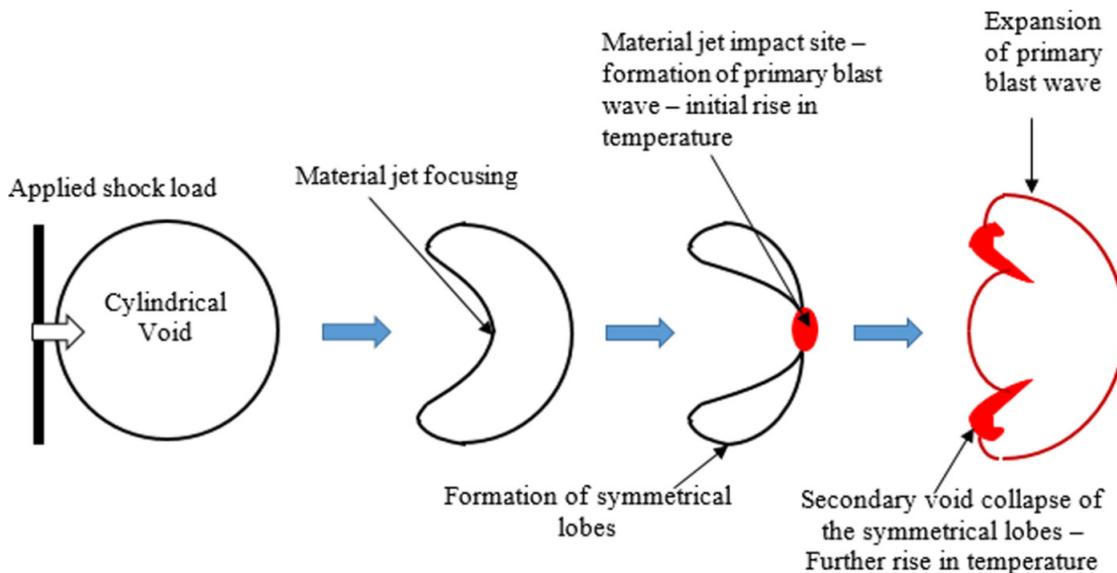


FIGURE 2.3 – Illustration de l'effondrement d'un pore sous l'effet d'une onde de choc (tiré de [34]).

La morphologie du pore ainsi que son orientation jouent un rôle important sur la température induite lors de son effondrement. Ainsi, l'effondrement de pores allongés dans le sens de propagation du choc engendre des températures plus importantes que celles induites par l'effondrement de pores sphériques et de pores allongés perpendiculaires au sens de propagation du choc [36].

De telles cavités peuvent également exister dans le liant : on parle alors de porosité extragranulaire [33]. Il est néanmoins supposé que la contribution de ce type de porosité à la TCD est relativement faible par rapport à la porosité intragranulaire [33].

2.2.2 Les réflexions d'ondes

Les explosifs solides, en tant que matériaux hétérogènes, sont composés de plusieurs phases ayant des impédances acoustiques différentes (figure 2.2). Ainsi, le passage d'une onde de choc induit des phénomènes de réflexions d'ondes, notamment aux interfaces entre le liant et les grains énergétiques. Ces phénomènes peuvent également se produire lorsque des impuretés ayant une masse volumique élevée sont présentes dans l'explosif [31].

Menikoff [31] a étudié la présence de telles impuretés en tant que mécanisme potentiel d'apparition de points chauds. Pour cela, des simulations sans réactivité ont été réalisées, en modélisant des impuretés dans un matériau homogène sous forme de particules sphériques. Dans ces simulations, un choc est généré dans le matériau et interagit avec les particules. L'interaction entre l'onde de choc incidente et les particules donne naissance à des pieds de Mach suite à des réflexions de choc irrégulières [37]. Une illustration du phénomène est disponible en figure 2.4. Les niveaux de température sont plus élevés en aval du pied de Mach qu'à la suite d'une réflexion régulière, et des points chauds pourraient être localisés au voisinage de la trajectoire des points triples.

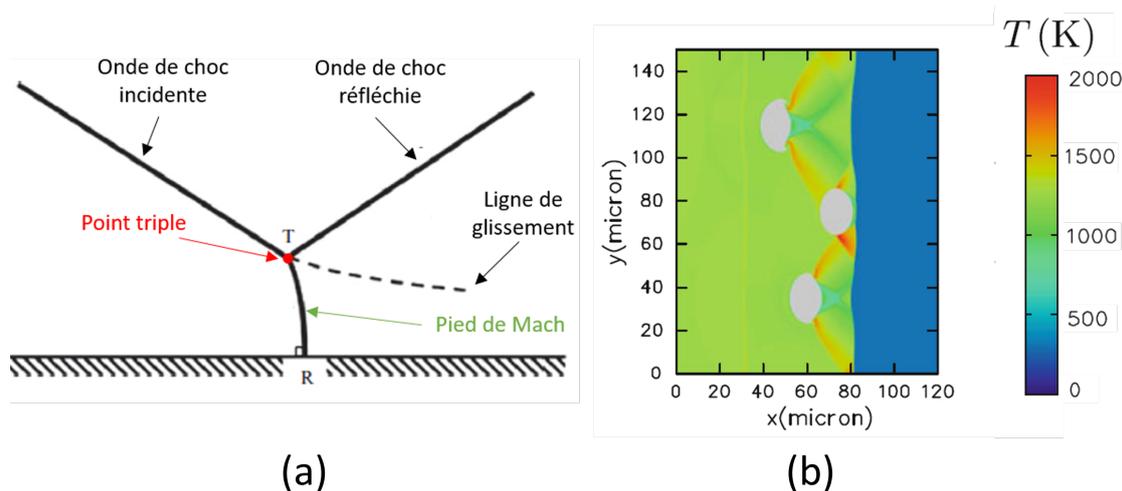


FIGURE 2.4 – Illustration d'un pied de Mach adapté de [37] (a) et de l'élévation de la température le long des trajectoires des points triples, issu de [31] (b).

Si ces simulations sont réalisées pour étudier le rôle des impuretés, les résultats peuvent être étendus aux effets des interactions des ondes de choc avec des grains énergétiques dans un liant. Des résultats similaires sont notamment retrouvés dans l'article de Belon *et al.* [38], où l'effet des réflexions d'une onde de choc sur des cristaux de RDX dans un liant est observé. L'influence de la forme des grains sur les réflexions d'ondes est également étudiée. Il semblerait notamment que des grains anguleux favorisent davantage l'apparition de points chauds que des grains sphériques.

2.2.3 L'endommagement et la friction

Des expériences d'impact de plaque en acier sur de l'azoture de plomb, réalisées par Chaudri [39], ont montré que les cristaux énergétiques peuvent se fracturer au passage d'une onde de choc. Lors de ces expériences, la formation de fissures ne s'accompagne pas de la détonation du cristal. Suite à ces observations, Field [32] conclut donc que la formation de fissures dans les cristaux n'induit pas d'élévation de température suffisamment intense pour générer des points chauds. Cette conclusion ne concerne cependant que les fissures générées par ouverture [40]. Dans le cas de fissures par cisaillement, la friction générée à l'interface des fissures pourrait être responsable d'une élévation de température suffisamment importante pour générer des réactions chimiques [40].

En plus de la friction générée à l'interface des fissures, des travaux ont permis d'identifier la friction inter-granulaire comme potentiel mécanisme de génération de points chauds [41]. Cependant, ces travaux traitent plutôt du phénomène de compaction de poudre que de l'amorçage d'explosifs solides, et certains auteurs considèrent que la pression engendrée dans l'explosif lors de l'impact empêche les déplacements relatifs des grains, inhibant ainsi la friction inter-granulaire [42].

2.2.4 Les bandes de cisaillement

Un potentiel mécanisme responsable de la génération de points chauds serait la formation de bandes de cisaillement lors du passage de l'onde de choc dans le matériau énergétique [27, 32, 43]. Ces bandes de cisaillement sont liées à une réorganisation de la microstructure du matériau énergétique lorsque la déformation plastique est importante. Elles peuvent ainsi générer des températures locales permettant l'amorçage de réactions chimiques [27]. Des bandes de cisaillement peuvent également se former lors de l'implosion de pores intra-granulaires [44-46]. Celles-ci apparaissent lorsque l'anisotropie du cristal énergétique est représentée dans les modèles numériques d'implosion de pores [44-46]. L'effondrement de pores engendre ainsi des déformations locales selon des plans cristallographiques spécifiques qui induisent dans l'explosif une température importante. Bien que les réactions chimiques restent localisées dans la zone d'implosion du pore, les bandes de cisaillement dues à son implosion peuvent être elles aussi responsables de l'amorçage de réactions chimiques dans le cristal énergétique [44]. L'anisotropie des cristaux favorise donc l'apparition des points chauds, même si elle ne constitue pas un mécanisme d'apparition en soi.

2.2.5 Synthèse

Bien que l'effondrement de pores soit actuellement le mécanisme de génération de points chauds le plus étudié [11], de nombreux autres mécanismes semblent participer à l'apparition de ces points chauds. Les mécanismes présentés dans ce manuscrit sont un aperçu des mécanismes identifiés comme potentiellement responsables de l'apparition de points chauds, et ne constituent pas une liste exhaustive de ceux recensés dans la littérature. Un schéma récapitulatif de ces mécanismes est représenté sur la figure 2.5.

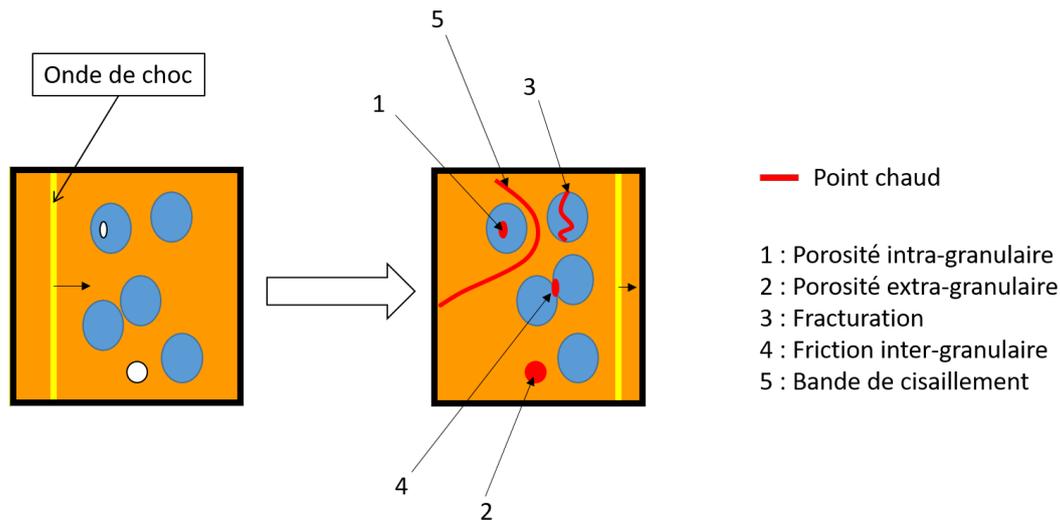


FIGURE 2.5 – Illustration des mécanismes potentiels d'apparition de points chauds.

Face à cette multitude de mécanismes, il est probable qu'il n'y ait pas un unique mécanisme qui soit prépondérant par rapport aux autres [29]. L'existence d'explosifs solides présentant une sensibilité au choc similaire malgré une porosité différente suggère que d'autres mécanismes que l'implosion de pores peuvent être responsables de l'apparition de points chauds [11]. Il est également probable que les mécanismes mis en jeu varient selon le régime de sollicitation considéré [11, 29]. Il se pourrait ainsi que certains mécanismes soient prépondérants pour des impacts faibles, tandis que d'autres mécanismes soient responsables de l'apparition de points chauds pour des impacts forts [41].

2.3 Observation des points chauds

À l'heure actuelle, la compréhension de l'apparition des points chauds et de leur comportement se résume *quasi* exclusivement à des résultats issus de simulations numériques, de raisonnements théoriques [9], ou est déduite d'observations indirectes [47]. Ce manque de données expérimentales s'explique par les contraintes liées à l'observation des points chauds, dont la taille et la durée sont respectivement inférieures au micromètre et à la microseconde [9]. Néanmoins, une équipe de l'université d'Illinois a récemment conçu un dispositif expérimental permettant l'observation directe de points chauds soumis à des chocs non soutenus [9, 10]. Ces chocs sont générés par

l'impact d'une plaque propulsée par choc laser. Deux approches sont alors employées pour étudier les points chauds. La première consiste à utiliser des échantillons ne contenant qu'une seule couche de cristaux, aussi appelés couches minces (voir figure 2.6) et permet de mesurer la fraction volumique de points chauds [48]. La deuxième approche consiste à isoler un cristal énergétique dans une matrice de liant [9]. Ces cristaux peuvent être des monocristaux ou des polycristaux (figure 2.6). Isoler les cristaux permet notamment de réduire la complexité de la microstructure et de mieux comprendre comment les points chauds se développent dans chaque cristal [9].

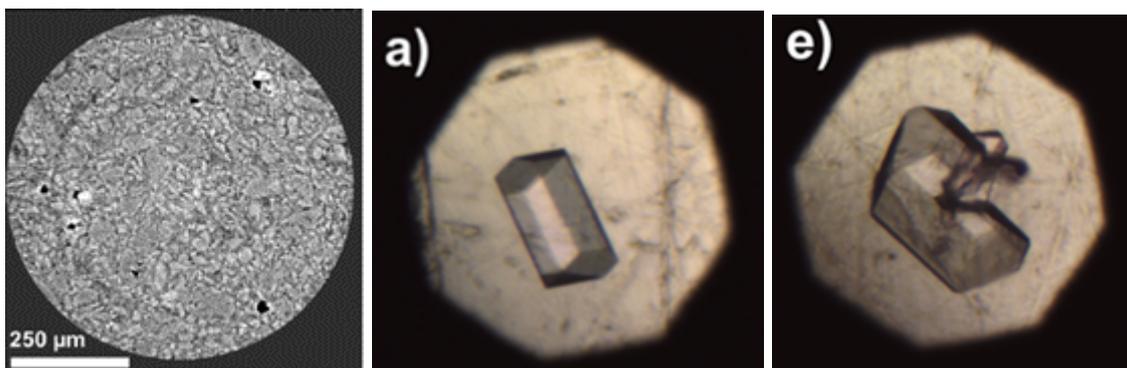
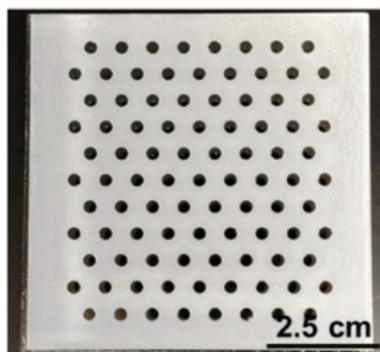
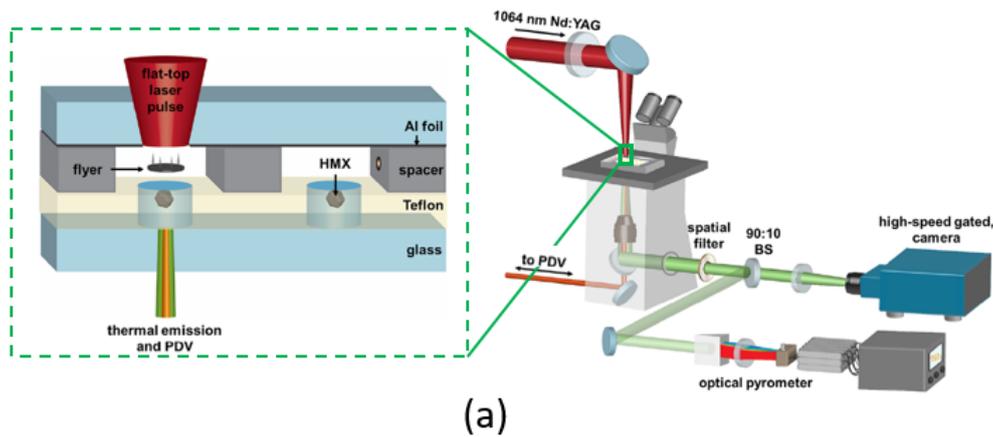


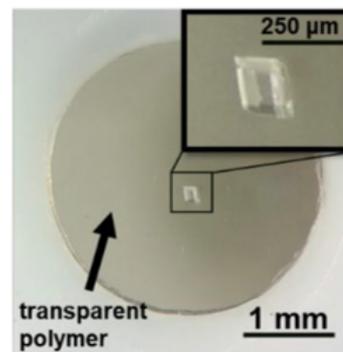
FIGURE 2.6 – Illustration d'une couche mince [49] (gauche) d'un monocristal [9] (milieu) et d'un polycristal [9] (droite)

Chaque cristal possédant des caractéristiques morphologiques uniques, cette approche nécessite l'observation d'un nombre relativement important de cristaux pour mieux appréhender la dynamique des points chauds. Pour ce faire, les expériences sont réalisées sur une multitude de cibles, agencées en grille, ce qui permet de disposer d'un grand nombre d'échantillons d'étude. La figure 2.7 illustre le dispositif expérimental employé pour ces études.

Un pyromètre optique est utilisé afin de mesurer la radiance spectrale sur 32 longueurs d'onde comprises entre 450 nm et 825 nm toutes les 0.8 ns. La température et l'émissivité de l'échantillon sont alors déduites de cette mesure en utilisant l'approximation du modèle de corps gris [10]. Cependant, l'utilisation de ce dispositif de mesure ne permet de détecter que les températures supérieures à 2000 K [10]. Ainsi, si un point chaud est détecté, cela signifie que sa température excède 2000 K : les expériences réalisées ne donnent donc pas d'information sur la génération des points chauds, mais plutôt sur leur croissance [10]. Ce dispositif est employé aussi bien pour l'observation de points chauds en couches minces que dans les cristaux isolés. Ces deux approches sont par conséquent complémentaires : l'une apporte des informations locales à l'échelle du grain tandis que l'autre apporte des informations à l'échelle de la microstructure.



(b)



(c)

FIGURE 2.7 – (a) Dispositif expérimental utilisé pour les expériences d’observation des points chauds du laboratoire Dlott [10]. Un dispositif similaire est employé dans travaux sur les couches minces [47]. (b) Grille multicible employée dans ces expériences, issue de [10]. (c) Monocristal isolé dans une matrice de liant, issue de [10].

2.3.1 Points chauds dans un cristal

Afin d’observer l’apparition des points chauds dans les cristaux énergétiques, Johnson *et al.* a réalisé des impacts de plaques sur une centaine de cristaux et de polycristaux de HMX isolés dans un liant en polyuréthane [9, 10]. Du fait de la sensibilité du dispositif de mesure, les points chauds observés présentent une température supérieure à 2000 K . Ainsi, c’est l’explosion thermique des points chauds générés par le choc qui est observée et non pas les points chauds eux-mêmes [10].

Pour des monocristaux, les signaux mesurés ne permettent pas de déterminer avec précision la température ou les émissivités pour des temps inférieurs à 20 ns après l’arrivée du choc dans le cristal. Lorsque le signal en permet la mesure, les températures initiales des points chauds sont de l’ordre de 3800 K, soit bien supérieures au seuil de sensibilité du dispositif de mesure. Ainsi, avant 20 ns, l’onde de choc a produit des points chauds, mais ceux-ci sont encore trop froids ou trop petits pour permettre la détection du signal. Une fois que les gradients initiaux liés au choc se sont estompés, la température des points chauds se stabilise aux alentours de 3200 – 3400 K. Cette température est proche de la température de flamme du HMX : $T_f = 3200$ K. Cela indique

que l'on se trouve dans un régime de déflagration.

Les points chauds observés sont principalement localisés aux bords et aux coins des monocristaux (Figure 2.8). L'origine de ces points chauds est attribuée : soit à une élévation de la température à ces endroits du fait de réflexions d'ondes sur les surfaces obliques du cristal, soit à la décohésion entre le monocristal et le liant, qui génère un échauffement du cristal par déformation plastique [9]. Selon les auteurs, l'énergie accumulée dans le monocristal au passage du choc serait libérée lors de la combustion du HMX, ce qui pourrait expliquer que la température des points chauds est supérieure à la température de flamme du HMX aux premiers instants après le choc. De plus, l'augmentation de la pression de choc a peu d'influence sur la température initiale des points chauds mesurée par le dispositif.

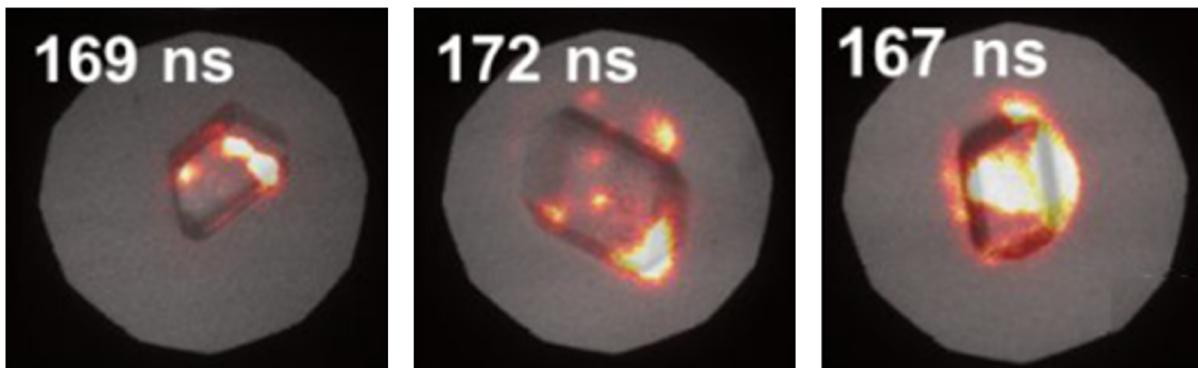


FIGURE 2.8 – Illustration de la combustion d'un monocristal de HMX pour un impact de plaque à 2500 m s^{-1} (gauche) à 2800 m s^{-1} (milieu) et à 3000 m s^{-1} (droite) [10].

Ces observations indiquent que, lorsque les premiers points chauds sont détectés par le dispositif de mesure, la combustion du HMX est déjà établie. Les réactions chimiques se développent dans le cristal suite à la propagation d'une flamme qui s'établit initialement à sa surface. Il a également été observé que le volume des premiers points chauds observés est plus important pour des vitesses d'impact élevées. Comme pour les mesures de température, cette mesure ne correspond pas à l'apparition même des points chauds puisque les réactions chimiques sont déjà établies. Par conséquent, cela indique soit que les points chauds générés par le passage du choc sont plus nombreux, soit que les réactions chimiques apparaissent plus tôt, ou se propagent plus vite lorsque le choc est intense. Il est probable que l'augmentation du volume initial des points chauds résulte d'une combinaison de ces effets.

Les polycristaux, quant à eux, possèdent une structure plus complexe. Aux premiers instants suivant le passage du choc, les points chauds générés atteignent une température de l'ordre de 6000 K . Ces points chauds sont localisés au niveau des pores internes, ou des jonctions polycristallines. Néanmoins, ils sont associés à une faible émissivité. Ils ne représentent donc qu'une région très faible du cristal, et ils finissent par se dissiper au bout de quelques dizaines de nanosecondes (voir figure 2.9). Après cette dissipation, la combustion observée est similaire à celle des monocristaux et les points chauds observés aux premiers instants suivant le choc dans la structure polycristalline ne semblent pas avoir d'impact majeur sur celle-ci.

Ces observations concernant la combustion des polycristaux n'ont été réalisées qu'à une

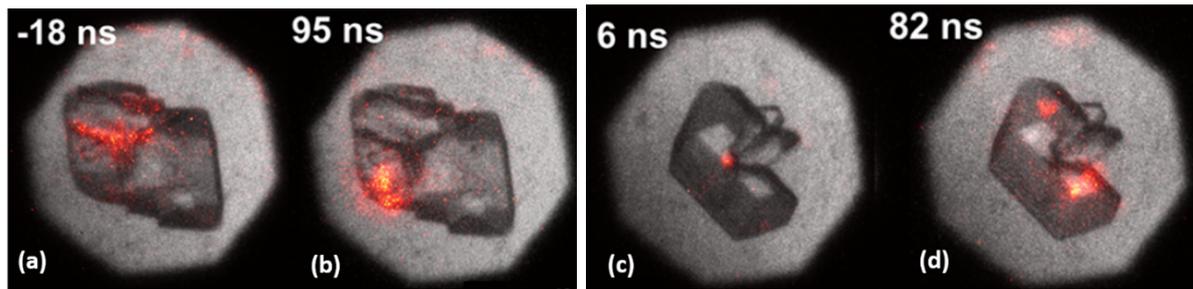


FIGURE 2.9 – Illustration de la présence de points chauds au niveau des défauts d'agrégats polycristallins de HMX (a,c) et de leur disparition (b,d) [9].

vitesse d'impact fixe. L'influence de la vitesse d'impact sur l'apparition des points chauds dans les polycristaux n'a pas été étudiée.

Les observations expérimentales de Johnson *et al.* [9, 10] sont particulièrement importantes puisqu'elles permettent de localiser les sites préférentiels de réaction dans un cristal soumis à un choc non soutenu. Il convient néanmoins d'apporter quelques précisions concernant ces résultats. Pour pouvoir localiser la présence des points chauds dans les cristaux, l'image des cristaux au repos est superposée aux images des intensités lumineuses obtenues par caméra rapide. Les couleurs employées sont choisies afin que l'intensité maximale de chaque image ait la même couleur [9]. Par conséquent, si une même couleur est observée pour deux images différentes, cela ne veut pas dire que les températures associées sont égales. Ces images donnent des informations sur la position de points chauds, par rapport à la position au repos du cristal : elles ne représentent pas la position réelle du point chaud dans le cristal choqué [9]. L'échelle de couleur utilisée, quant à elle, permet de détecter les sites de température plus élevée dans une image donnée, à un instant donné. L'information obtenue est un champ de température relative à la température maximale de l'image. Enfin, ces observations donnent des informations sur l'apparition de points chauds dans des cristaux isolés soumis à un choc non soutenu. Pour des chocs soutenus, il est possible que la phénoménologie diffère. De plus, dans les explosifs hétérogènes, un grand nombre de cristaux cohabitent. Le comportement sous choc des explosifs hétérogènes pourrait donc être différent de celui des cristaux isolés. Il est primordial que l'étude des cristaux isolés s'accompagne d'expériences avec des échantillons présentant un grand nombre de cristaux afin de pouvoir comparer les résultats des deux approches.

2.3.2 Points chauds dans une couche mince

L'observation de cristaux énergétiques isolés dans une matrice (voir section précédente) permet de visualiser la croissance des points chauds, mais ne renseigne pas pour autant sur leurs effets collectifs. Pour étudier l'apparition des points chauds dans une structure plus représentative de l'explosif, il est possible d'utiliser des échantillons ne contenant qu'une seule couche de cristaux, aussi appelées couches minces. Bassett *et al.* [47] ont utilisé une variation du dispositif employé par Johnson *et al.* [9, 10] pour étudier l'évolution des points chauds dans des couches minces. Les couches minces employées sont de 1 mm de diamètre et de 42 μm d'épaisseur. Les compositions

étudiées présentent une fraction massique de cristaux énergétiques de 0,8 et une fraction massique d'un liant en Sylgard de 0,2. Quatre types de cristaux énergétiques sont étudiés : le RDX, le PETN, le TNT, et le TATB. Les compositions associées sont respectivement appelées X-RDX, X-PETN, X-TNT et X-TATB. Les différentes couches minces sont impactées à plusieurs vitesses et le choc transmis dans la configuration d'étude est non soutenu. Lorsque le TATB est sous forme solide, l'hypothèse de corps gris est mise en défaut pour des longueurs d'ondes inférieures à 550 nm [50]. Les mesures obtenues pour cette composition présentent donc des incertitudes importantes et ne sont présentées qu'à titre indicatif par les auteurs [47]. Nous ne la traiterons donc pas dans cet état de l'art. L'analyse des profils temporels de la température moyenne des différentes compositions montre des différences de comportement selon la composition, mais aussi selon la vitesse d'impact (figure 2.10). Ainsi, la température initiale des points chauds du X-TNT varie selon la vitesse d'impact, tandis qu'elle reste relativement constante pour le X-RDX et le X-PETN. Pour les compositions X-PETN et X-TNT, la température décroît temporellement pour toutes les vitesses d'impact. Pour le X-RDX, on observe une augmentation de la température aux premiers instants, puis une décroissance. Cependant, plus la vitesse d'impact est élevée, moins l'augmentation de la température est marquée. Pour une vitesse d'impact de 3500 m s^{-1} , l'augmentation de température est trop faible pour être observée, et la décroissance de la température dans le X-RDX devient monotone.

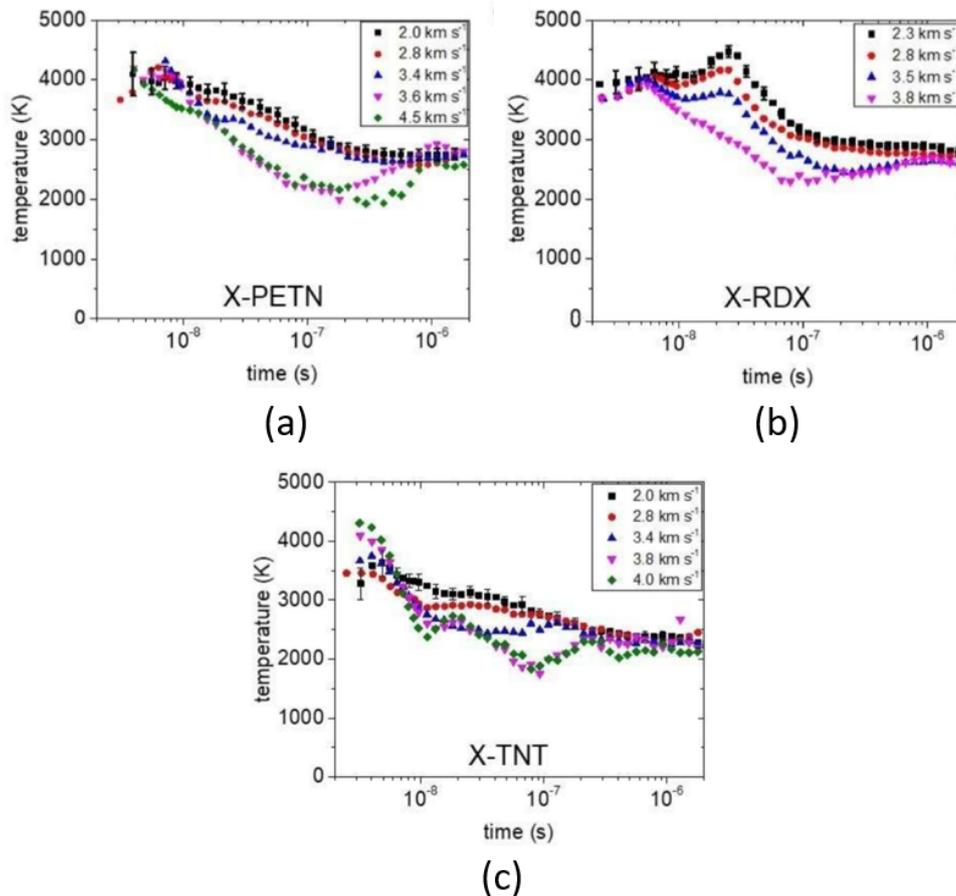


FIGURE 2.10 – Evolution temporelle de la température des points chauds pour les compositions de X-PETN (a) de X-RDX (b) et de X-TNT (c) pour différentes vitesses d'impact [47].

D'après les auteurs, pour le X-RDX et le X-PETN, le fait que l'évolution de la température des points chauds varie avec la vitesse d'impact alors que leur température initiale reste stable est dû à une évolution différente des réactions chimiques dans les points chauds en fonction de la vitesse d'impact. Ainsi, à basse vitesse d'impact, les points chauds sont peu nombreux et on peut donc supposer qu'ils sont isolés les uns des autres. Les réactions chimiques sont donc confinées. Pour des vitesses d'impact élevées, les points chauds sont plus nombreux, et la vitesse de déflagration associée aux réactions chimiques est plus importante. Les points chauds vont donc coalescer et déconfiner les réactions chimiques. Ce déconfinement devrait alors induire une pression, et donc une température, plus faible des points chauds par rapport aux configurations à faible vitesse d'impact où les points chauds restent confinés. En revanche, l'émissivité mesurée suit une croissance exponentielle en fonction de la vitesse de l'impacteur. Cette évolution indique que la fraction volumique de points chauds augmente avec la pression de choc.

Dans leurs travaux réalisés en 2020, Johnson *et al.* [9] ont également comparé les mesures obtenues pour des monocristaux et des polycristaux de HMX avec celles obtenues pour une couche mince composée de HMX et de Sylgard [9]. En moyenne, la température mesurée initialement dans les points chauds est plus élevée dans les polycristaux que dans la couche mince, tandis qu'elle est la plus faible dans les monocristaux. Néanmoins, les points chauds persistent plus longtemps dans la couche mince. Pour des temps plus longs, la température du monocristal et du polycristal convergent tous deux vers 3200 K, tandis que la température dans la couche mince converge vers une valeur légèrement plus faible. Cette différence est attribuée au fait que, dans la couche mince, les cristaux de HMX sont plus fins et sont donc refroidis plus rapidement par le liant environnant que les cristaux isolés, plus gros.

Le dispositif employé par Bassett *et al.* [47] a ensuite été repris par Akhtar *et al.* [50] pour étudier des couches minces d'un explosif contenant 80 % de TATB et 20 % de Sylgard. Les dimensions employées pour les couches minces sont les mêmes que celles utilisées par Bassett *et al.* [47]. Elles sont comprimées afin de réduire la porosité dans les échantillons. Une caractérisation de la microstructure des couches minces est également réalisée, avant et après la compression, afin de tenir compte de l'endommagement engendré. Douze vitesses d'impact sont considérées allant de 1800 m s^{-1} à 3500 m s^{-1} . L'évolution temporelle de la radiance mesurée dans les couches minces est ensuite étudiée. L'intensité de la radiance dépend à la fois du volume de matière émettant un flux lumineux, mais également de sa température. Elle permet ainsi de quantifier l'apparition des points chauds dans la couche mince. Comme mentionné précédemment, le TATB solide absorbe la lumière pour les longueurs d'onde inférieures à 550 nm. En revanche, les produits de détonation issus de sa décomposition sont transparents. Une procédure a donc été mise en place afin que les régions perturbées par l'absorption du TATB solide ne soient pas prises en compte dans les mesures effectuées. Pour tous les tirs réalisés, les évolutions temporelles de radiance présentent deux pics caractéristiques. Un exemple de profil temporel de radiance mesuré pour un impact à 1800 m s^{-1} ainsi qu'un schéma explicatif de la phénoménologie associée sont présentés en figure 2.11. Lorsque l'onde de choc traverse la couche mince, les premiers points chauds apparaissent, ce qui se traduit par une augmentation de la radiance, jusqu'à un premier pic (figure 2.11.c). Une fois ce pic atteint, certains points chauds vont s'éteindre du fait de la

conduction thermique avec l'explosif non réagi, dont la température est plus faible (figure 2.11.d). La radiance diminue donc, jusqu'à atteindre un point de selle. L'amplitude de ce point de selle n'est alors due qu'aux points chauds ayant une température suffisamment élevée pour ne pas être éteints *via* les pertes thermiques induites par la conduction. Après ce point de selle, un deuxième pic de radiance est observé, qui correspond à la croissance des points chauds restants dans l'explosif (figure 2.11.e). Plus la vitesse d'impact est élevée, plus l'amplitude de ce second pic de radiance est importante.

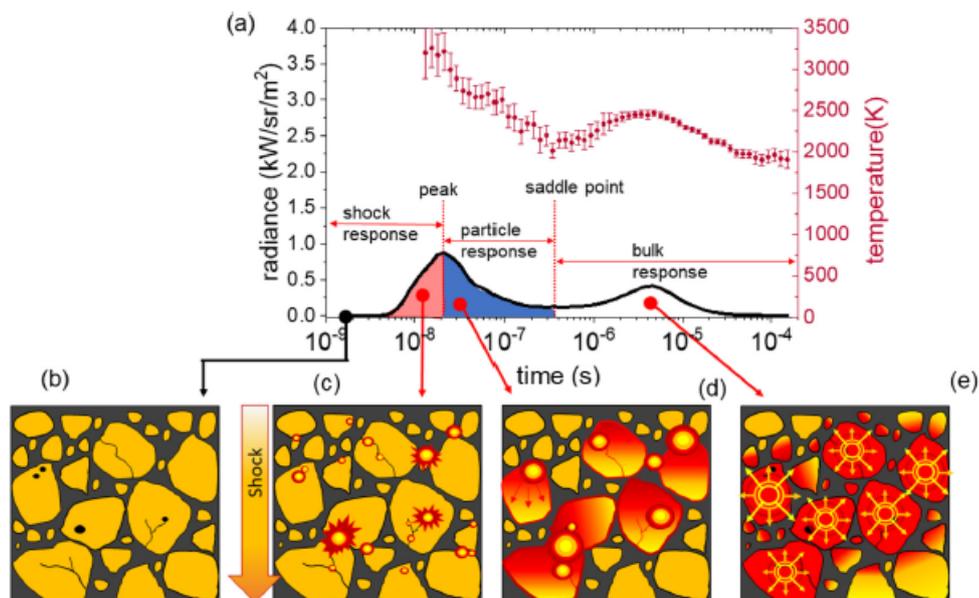


FIGURE 2.11 – Exemple d'un profil de radiance mesuré pour une couche mince à base de TATB et une vitesse d'impact de 1800 m s^{-1} (a) Illustration des mécanismes en jeu dans la couche mince lors de l'impact (b-e) issus de [50].

La possibilité d'observer spatialement la répartition des points chauds dans la couche mince a été intégrée au dispositif expérimental. Dans un premier temps, un algorithme de détection de contours est appliqué sur les cristaux énergétiques de la couche mince. À l'instar du procédé employé pour les cristaux de HMX, les images de l'intensité lumineuse sont superposées aux contours des cristaux de la couche mince au repos. Ce procédé a ainsi été appliqué dans l'étude de Sellan *et al.* [51] à des couches minces composées de 80 % de HMX et d'un liant en epoxy. Seule une vitesse d'impact de 4300 m s^{-1} a été employée. Dans un premier temps, la localisation des points chauds a été mesurée durant leur phase d'amorçage, *i.e.* lors du premier pic de radiance (voir figure 2.11.a). Aux premiers instants après l'impact ($t = 0 \text{ ns}$), un premier point chaud est formé. Au bout de 10 ns, après que les effets de l'onde de choc se soient dissipés, de nouveaux points chauds apparaissent au niveau des contours des cristaux (figure 2.12). Cette détection tardive des points chauds est attribuée à la sensibilité du dispositif, dont le seuil de sensibilité est de 1800 K. Par conséquent, les points chauds devraient déjà être présents aux instants associés aux premières images mais ne possèdent pas une température suffisante pour être détectés. Durant la phase de croissance, *i.e.* lors du second pic de radiance (voir figure 2.11.a), les images indiquent une coalescence des points chauds en un front de déflagration global se propageant rapidement

dans tout l'échantillon (figure 2.13) .

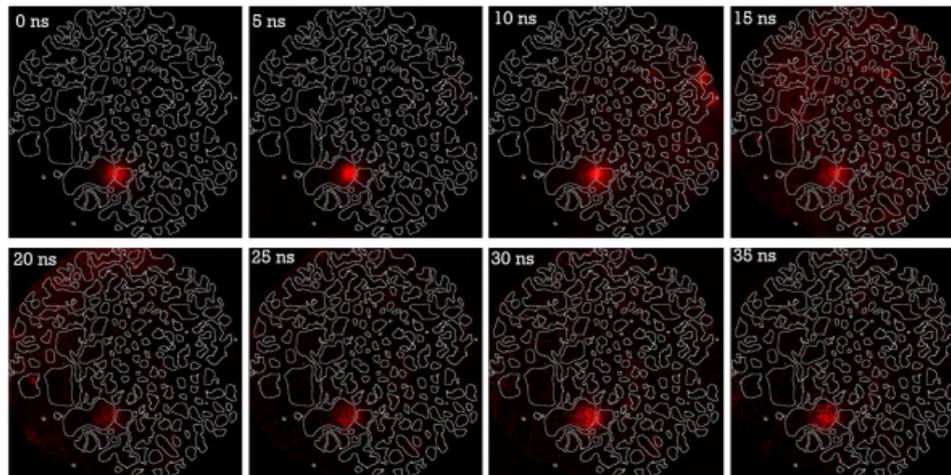


FIGURE 2.12 – Illustration de la présence de points chauds dans une couche mince à base de HMX durant le premier pic de radiance (voir figure 2.11.a) [51].

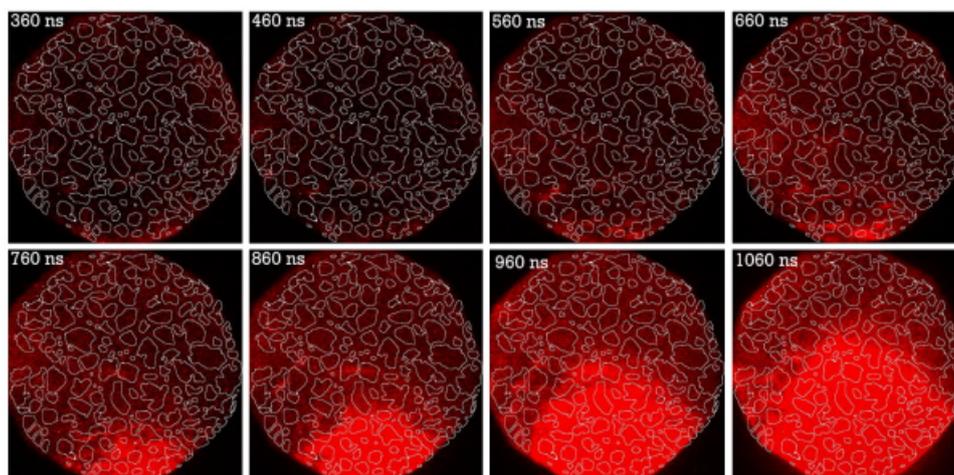


FIGURE 2.13 – Illustration de la présence de points chauds dans une couche mince à base de HMX durant le second pic de radiance (voir figure 2.11.a) [51].

2.3.3 Synthèse

Lorsqu'un cristal de HMX est soumis à un choc, les réactions chimiques semblent se développer principalement au niveau des bords et des angles du cristal. Lorsqu'il s'agit d'un polycristal, les points chauds peuvent également se développer au niveau des défauts que celui-ci présente. Cependant, les points chauds localisés dans les défauts internes des polycristaux se dissipent rapidement. La combustion des polycristaux se développe donc principalement en surface du cristal, comme pour les monocristaux.

Dans le cas des couches minces, l'augmentation de la pression de choc entraîne une croissance exponentielle de la fraction volumique de points chauds. L'évolution temporelle de la température des points chauds, pour un matériau donné, semble dépendre de la pression de choc. Selon les auteurs, cela peut s'expliquer par l'augmentation de la fraction volumique de points chauds, qui, à partir d'une pression seuil, seront suffisamment nombreux pour coalescer. On passerait alors d'un régime de points chauds isolés à un régime de points chauds coalescés. Dans les couches minces, le développement des points chauds présente une phénoménologie en deux étapes, avec l'observation de deux pics de radiance. Dans un premier temps, les points chauds sont amorcés par l'onde de choc. Après leur amorçage, certains points chauds s'éteignent du fait de la conduction thermique avec l'explosif non réagi. Dans un second temps, la croissance des points chauds restants a lieu.

Une comparaison succincte entre les points chauds dans un cristal de HMX et ceux dans une couche mince composée de HMX a été réalisée par Johnson *et al.* [9]. Elle montre que les points chauds dans la couche mince ont une température, en moyenne, comprise entre la température des points chauds des cristaux sans défauts, et la température des points chauds des agrégats polycristallins. Cependant, les points chauds dans les couches minces sont plus nombreux et persistent plus longtemps que dans les cristaux isolés, ce qui pourrait témoigner d'effets d'interaction.

Plus récemment, la possibilité d'observer directement la répartition spatiale des points chauds dans une couche mince a été ajoutée au dispositif expérimental. Les premiers travaux employant ce moyen de mesure ont été présentés dans la communication de Sellan *et al.* [51] en 2023. De telles observations devraient permettre une meilleure compréhension de la décomposition d'un explosif soumis à une onde de choc.

Sensibilité d'un explosif

Sommaire

3.1	Le Pop-Plot	34
3.2	Notion de profondeur de transition	35
3.3	Représentation du Pop-Plot	40
3.4	Principe de courbe unique de transition	43
3.4.1	Incompatibilité du critère d'intersection des pentes avec l'hypothèse de courbe unique de transition	44
3.4.2	Interprétations théoriques et conséquences sur le Pop-Plot	45
3.4.3	Application au PBX-9501	54
3.5	Synthèse	60

Dans une munition, le choix des compositions explosives résulte souvent d'un compromis entre leurs différentes propriétés. Parmi elles, la sensibilité et les performances font partie des caractéristiques importantes à considérer. La connaissance des paramètres qui influencent la sensibilité des explosifs est primordiale pour réduire les risques et optimiser les munitions. Dans un grand nombre d'applications, l'amorçage des charges explosives est réalisé par une onde de choc. La sensibilité au choc des explosifs est donc un enjeu important pour garantir le bon fonctionnement d'une munition, en assurant un amorçage nominal. Bien que le terme de sensibilité au choc soit souvent employé de façon générique, on peut distinguer :

- la sensibilité au choc en termes d'amorçage. Elle consiste à quantifier le seuil d'amorçage d'un explosif, c'est à dire la pression du choc provoquant l'apparition des premiers points chauds. Dans certains cas, seuls les points chauds dits « critiques », *i.e* qui ne sont pas éteints par les pertes induites par la conduction thermique (voir section 2.3.2), sont considérés.
- la sensibilité au choc en termes de transition choc-détonation. Elle consiste à déterminer, pour une pression de choc initiale, la profondeur à laquelle le choc transite en détonation, aussi appelée profondeur d'amorçage ou profondeur de transition.

La notion de sensibilité au choc d'un explosif doit donc être considérée avec prudence. En effet, il est possible qu'un explosif donné soit plus sensible qu'un autre explosif en termes de seuil d'amorçage, tout en étant moins sensible en termes de transition choc-détonation. De plus, bien qu'elle soit généralement employée pour des configurations de choc soutenu, la notion de sensibilité au choc peut également être utilisée dans le cadre de choc non soutenus. Enfin, le terme

de profondeur d'amorçage est impropre puisqu'il ne caractérise pas l'amorçage d'un explosif, mais sa transition choc-détonation. Cette ambiguïté est propre à la langue française, puisqu'en anglais, le terme employé est *Run-Distance to Detonation* qui peut se traduire par « distance nécessaire à parcourir [par l'onde de choc] pour atteindre la détonation ». Ainsi, il est plus correct de parler de profondeur de transition à la détonation (ou, en plus court, de profondeur de transition). Afin d'éviter toute confusion, nous emploierons le terme de profondeur de transition dans la suite de ce manuscrit. Dans le cadre de cette thèse, nous nous focaliserons essentiellement sur la sensibilité au choc des explosifs en termes de transition choc-détonation pour des chocs soutenus. Sauf mention contraire, nous emploierons le terme de sensibilité pour désigner ce sujet.

3.1 Le Pop-Plot

La méthode la plus répandue pour déterminer la sensibilité au choc d'un explosif consiste à mesurer l'évolution de sa profondeur de transition, notée x^* , en fonction de la pression de choc initiale [52]. La courbe, tracée en échelle logarithmique, apparaît en général sous la forme d'une droite (voir figure 3.1.b). On parle de Pop-plot, du nom d'Alphonse Popolato qui a été le premier à l'avoir utilisée [53]. Historiquement, le Pop-Plot est obtenu en réalisant une série d'expériences dites du « test du coin » (ou *wedge test* en anglais). Ces expériences consistent à impacter un explosif en forme de coin avec une plaque métallique (voir figure 3.1.a). L'onde de choc générée dans l'explosif est soutenue, c'est à dire que le niveau de pression peut être maintenu constant pendant une durée suffisante pour le phénomène d'étude, et les angles du coin sont dimensionnés afin que les détente latérales ne perturbent pas l'écoulement en aval du choc. Dans les régions non perturbées par les détente, l'écoulement est unidimensionnel. Des aiguilles piézoélectriques sont placées le long du coin afin de mesurer la trajectoire du choc. La profondeur de transition est ensuite déduite du diagramme de marche obtenu. Chaque test du coin réalisé permet de mesurer la profondeur de transition à une pression de choc initiale donnée, ce qui correspond à un point sur le Pop-Plot. Le Pop-Plot donne ainsi une quantification directe de la sensibilité au choc des explosifs : pour une pression donnée, plus la profondeur de transition d'un explosif est faible, plus celui-ci sera dit sensible. Il est possible qu'un explosif A soit plus sensible qu'un explosif B à faible pression d'impact, mais moins sensible à haute pression d'impact. Dans ce cas, les Pop-Plots de l'explosif A et de l'explosif B seront sécants.

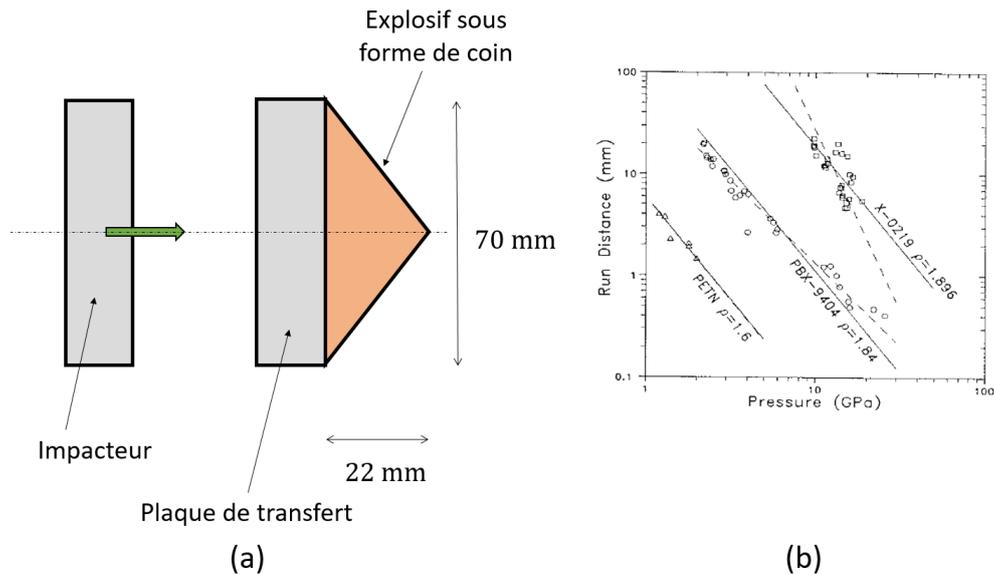


FIGURE 3.1 – Illustration du test du coin (a) et d'un Pop-Plot [54] (b).

3.2 Notion de profondeur de transition

Comme nous avons pu le voir, la notion de sensibilité au choc en termes de transition choc-détonation s'appuie essentiellement sur la détermination de la profondeur de transition d'un explosif à une pression d'impact donnée. D'un point de vue physique, elle représente la profondeur à laquelle une onde de choc soutenue et initialement à la pression P_i évolue en détonation. Cependant, à l'heure actuelle, il n'existe pas de définition standardisée de la profondeur de transition, qui est déterminée à partir de critères plus ou moins arbitraires. Malgré cette absence de norme, on retrouve usuellement trois critères dans la détermination de la profondeur de transition :

- Critère d'intersection des pentes :

Il s'agit de la méthode employée historiquement pour déterminer la profondeur de transition consistant à tracer deux droites sur le diagramme de marche afin d'obtenir leur point d'intersection. La première droite était tracée à partir des premiers points du diagramme, correspondant ainsi à la trajectoire du choc dans l'explosif "inerte", et la seconde à partir des derniers points du diagramme, correspondant ainsi à la trajectoire de la détonation établie. La profondeur de transition est ensuite déterminée comme étant le point d'intersection entre ces deux droites (voir figure 3.2).

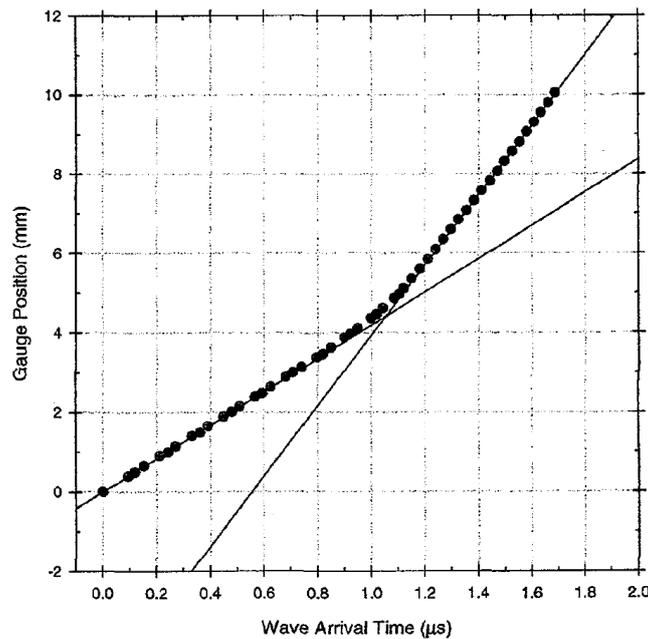


FIGURE 3.2 – Diagramme de marche du PBX-9501 issu de [55]. Les pentes correspondant au choc inerte et à la détonation établie sont tracées et leur intersection définit la profondeur de transition

Ce critère a été largement employé pour déterminer la profondeur de transition des explosifs [52, 56-61]. Il est cependant imprécis [55] et peu reproductible [2]. En effet, les diagrammes de marche obtenus expérimentalement ne comptent parfois qu'un faible nombre de points : le choix des droites à tracer est donc fortement dépendant de l'opérateur [1, 2].

Une variante de cette méthode a également été utilisée. Elle consiste à effectuer une régression linéaire sur le début du diagramme de marche pour déterminer la pente du choc "inerte", et sur la fin du diagramme pour déterminer la pente de la détonation [62, 63]. La profondeur de transition est alors calculée comme étant l'intersection de ces deux droites. L'utilisation de cette méthode réduit la dépendance des résultats à l'opérateur. Cependant, tout au long de sa propagation dans l'explosif, l'onde de choc accélère de façon continue (voir section 2.1). La vitesse de l'onde de choc initiale déterminée par la régression ne correspond donc pas à celle d'une onde de choc dans un explosif inerte. Un certain arbitraire persiste donc.

- Critère de vitesse de référence :

Plutôt que de travailler sur le diagramme de marche, qui est une mesure peu sensible, il est souvent préférable d'utiliser l'évolution spatiale de la vitesse du choc pour déterminer la profondeur de transition [64]. Cependant, cela s'accompagne d'une difficulté supplémentaire puisque les profils de vitesse de choc déduits du diagramme de marche sont souvent très bruités [2] (voir figure 3.3).

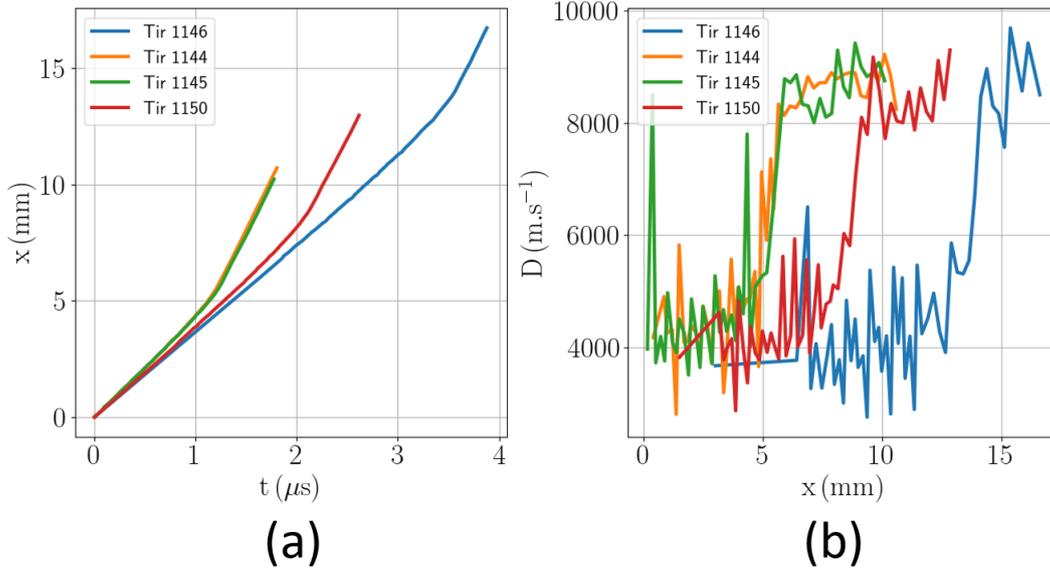


FIGURE 3.3 – Illustration des diagrammes de marche mesurés lors de tests du coin, issus de [55] (a) et des profils de vitesse de choc associés (b)

La méthode proposée par Gustavsen *et al.* [55] pour déterminer la profondeur de transition est de faire une régression d'une équation différentielle du second ordre avec les points du diagramme de marche.

Plusieurs expressions de l'équation différentielle à employer pour réaliser la régression ont été suggérées [55, 64] :

$$a(t) = \frac{\frac{a_m}{100} D(t)^{b+2} (D(t) - c_0)^{b+1} (D_{CJ} - D(t))}{(2D(t) - c_0) (D_{CJ} - 0.99D(t))} \quad (3.1)$$

où a correspond à l'accélération de l'onde de choc, t au temps, D_{CJ} à la vitesse de détonation de Chapman-Jouguet, c_0 à la vitesse du son et où b et a_m ($[\text{m.s}^{-1}]^{2b+2}$) sont des paramètres à calibrer.

$$a(t) = a_m \frac{D_{CJ} - D(t)}{D_{CJ} - D_m} \exp\left(\frac{D(t) - D_m}{D_{CJ} - D_m}\right) \quad (3.2)$$

où a_m (m.s^{-2}) et D_m (m.s^{-1}) sont des paramètres à calibrer. Le paramètre D_0 est la vitesse initiale du choc, déterminée expérimentalement.

Dans le cadre de cette thèse, nous emploierons une variante de ces équations :

$$a(t) = a_m \left(\frac{D_{CJ} - D(t)}{D_{CJ} - D_m}\right)^{m_{D_{CJ}}} \left(\frac{D(t) - c_0}{D_m - c_0}\right)^{m_{c_0}} \exp\left(\frac{D(t) - D_m}{D_{CJ} - D_m}\right) \quad (3.3)$$

avec c_0 la vitesse du son dans l'explosif au repos, et a_m (m.s^{-2}), D_m (m.s^{-1}), m_{c_0} et $m_{D_{CJ}}$ les paramètres à calibrer. Cette formulation permet de garantir que l'accélération des ondes sonique

($D = c_0$) est nulle et qu'elles ne transitent donc pas en détonation.

Une fois la régression réalisée, la profondeur de transition est déterminée comme étant la profondeur à laquelle la vitesse du choc, obtenue *via* la régression, atteint une valeur de $0.99D_{CJ}$. Historiquement, le choix d'une vitesse de référence de $0.99D_{CJ}$ a été réalisé arbitrairement [55], mais il reste régulièrement employé [55, 65-69]. Dans la littérature, d'autres vitesses de référence ont également pu être utilisées, comme dans les travaux de Burns *et al.* [70] où une vitesse de référence de $0.95D_{CJ}$ est utilisée plutôt que celle à $0.99D_{CJ}$.

Bien que l'emploi d'une vitesse de référence proche de D_{CJ} soit justifiée par la volonté de déterminer la profondeur à laquelle la détonation se forme dans l'explosif, celle-ci peut mener à des incertitudes relativement importantes sur la profondeur de transition dans certains cas.

Une illustration de ce critère de transition est présentée en figure 3.4.a. La figure 3.4.b illustre les incertitudes pouvant résulter de l'utilisation du critère de transition utilisant une vitesse de référence à $0.99D_{CJ}$. Ainsi, pour des vitesses de choc proches de $0.99D_{CJ}$, une incertitude de 1% sur la vitesse de choc s'accompagne d'une incertitude de 1.2 mm sur la profondeur de transition. Le profil de vitesse employé pour ces deux figures a été généré à partir de l'équation 3.3 pour un choc se propageant dans du HMX comprimé ($D_{CJ} = 9272 \text{ m s}^{-1}$, $c_0 = 3198 \text{ m s}^{-1}$) avec une vitesse initiale $D_0 = 4500 \text{ m s}^{-1}$. Les coefficients employés pour la génération du profil sont $a_m = 4.8 \cdot 10^9 \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$, $D_m = 5452 \text{ m s}^{-1}$, $m_{D_{CJ}} = 1.69$ et $m_{c_0} = 3.53$.

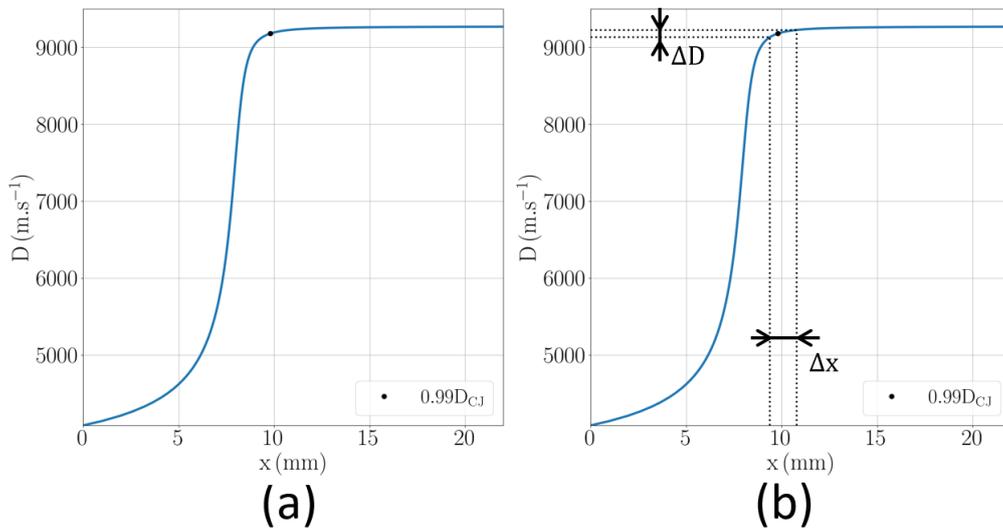


FIGURE 3.4 – (a) Illustration du critère de transition basé sur une vitesse de référence à $0.99D_{CJ}$ (b) Illustration des incertitudes pouvant résulter de l'utilisation du critère de transition utilisant une vitesse de référence à $0.99D_{CJ}$. Une incertitude de 1% sur la vitesse de choc s'accompagne d'une incertitude de 1.2 mm sur la profondeur de transition.

- Critère de l'accélération maximale :

Afin d'éviter les incertitudes engendrées par l'utilisation d'une vitesse de référence proche de D_{CJ} , une alternative est de définir la profondeur de transition comme la profondeur à laquelle l'accélération du choc est maximale. La méthode employée pour déterminer la profondeur de transition consiste alors à procéder d'une façon similaire à la méthode précédente et nécessite également une régression du diagramme de marche. La seule différence provient de la référence prise pour définir la profondeur de transition, qui est alors déterminée au point d'accélération maximale du choc. Plusieurs études ont utilisé ce critère pour déterminer la profondeur de transition d'un explosif [71-73]. Une illustration de ce critère de transition est présentée en figure 3.5.

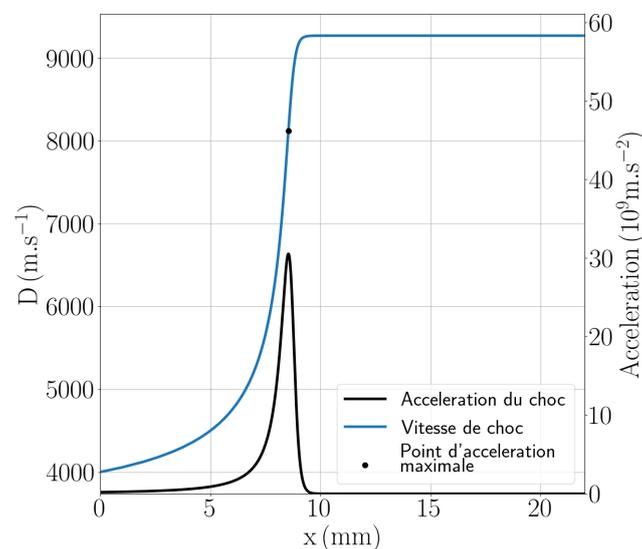


FIGURE 3.5 – Illustration du critère de transition associé à l'accélération maximale du choc.

Bien que cette définition nécessite d'employer les mêmes outils que ceux associés au critère précédent, sa philosophie se rapproche davantage de la méthode d'intersection des pentes, qui permettait d'obtenir une estimation du point d'inflexion de la vitesse du choc. L'utilisation d'une régression du diagramme de marche par une équation différentielle du second ordre rend cependant la méthode plus fiable et moins dépendante de l'opérateur.

Dans une étude réalisée sur de l'EDC-32 par Burns *et al.* [74], il est indiqué que le point d'inflexion de la vitesse de choc mesurée correspondait à une vitesse de choc de l'ordre de $0.95D_{CJ}$. Il est donc probable que ce soit cette constatation qui ait donné lieu à l'utilisation d'une vitesse de référence de $0.95D_{CJ}$ dans les travaux de Burns *et al.* [70]. Cependant, rien ne garantit que, pour d'autres explosifs que l'EDC-32, ce point d'inflexion soit nécessairement confondu avec une vitesse de choc de $0.95D_{CJ}$.

Paradoxalement, la notion de profondeur de transition telle qu'elle est définie actuellement ne correspond pas à la profondeur à laquelle une détonation se forme dans l'explosif mais à la profondeur nécessaire à un choc pour satisfaire un critère donné. Les critères généralement employés marquent tout de même un lien fort avec la TCD. En effet, l'intersection des pentes et le point d'inflexion de la vitesse du choc peuvent être vus comme des marqueurs du passage du choc à la détonation tandis que le critère à $0.99D_{CJ}$ peut être vu comme un quantificateur de la profondeur à laquelle une détonation établie se forme. Rien ne garantit cependant que ces critères soient associés à la formation d'une frontière sonique dans l'explosif, qui serait un marqueur de l'apparition d'une détonation.

Notion de zone d'influence

Dans le cadre d'une détonation stationnaire, la frontière sonique délimite la fin de la zone de réaction et l'isole des perturbations du milieu aval. Toutes les ondes en dehors de la zone de réaction ne contribuent donc pas à la propagation de la détonation. Lors de la TCD, la frontière sonique n'est pas encore établie : les ondes issues du milieu aval peuvent donc rattraper le front de choc. Néanmoins, toutes les ondes ne contribueront pas à la TCD. Pour qu'elles y participent, il faut que celles-ci aient le temps de remonter l'écoulement et de rattraper le front de choc avant qu'il n'ait transité en détonation et que la frontière sonique ne se soit formée.

Il est donc possible de définir une « zone d'influence », dans un contexte de TCD, qui correspond à la zone pour laquelle toute onde sonique émise sera capable de remonter l'écoulement et de rattraper le front de choc avant sa transition en détonation. Ainsi, pour qu'un point chaud contribue à la TCD, il faut que celui-ci apparaisse dans cette zone d'influence. L'épaisseur de la zone d'influence évolue au cours du temps. En régime stationnaire, la zone d'influence et la zone de réaction sont confondues, ce qui n'est pas nécessairement le cas lors de la TCD.

3.3 Représentation du Pop-Plot

Dans la littérature, le Pop-Plot est défini comme la représentation de l'évolution de la profondeur de transition en fonction de la pression de choc initiale dans un graphique en échelle logarithmique. Dans ce graphique, le Pop-Plot est représenté sous la forme d'une droite, et il est courant que la pente des Pop-Plots soit employée comme une caractéristique de la sensibilité d'un explosif [69, 75, 76]. Cette représentation linéaire du Pop-Plot en échelle logarithmique est employée car elle a été observée expérimentalement pour de nombreuses compositions [1]. Cependant, si le Pop-Plot était tracé pour des gammes de pression plus larges, la courbe observée devrait présenter une limite à faible pression et une asymptote pour les pressions élevées (figure 3.6). Pour démontrer cela, considérons un explosif semi-infini, soumis à un impact plan infiniment soutenu. On note P_i la pression associée à cet impact et D_0 la vitesse de l'onde induite dans l'explosif.

- **Valeur limite pour des pressions faibles :**

Considérons un impact générant une pression $P_i < P_{seuil}$, où P_{seuil} correspond au seuil d'amorçage de l'explosif. Par définition, aucun point chaud n'est généré dans l'explosif et l'onde de choc reste inerte : il n'y pas de TCD.

Considérons maintenant un impact plan soutenu dont le projectile est semi-infini et générant une pression $P_i = P_{seuil}$ dans l'explosif. L'onde de choc, en se propageant, génère alors au moins un point chaud. Même si ce point chaud est non critique, les réactions chimiques provoquées par son apparition génèrent des ondes de compression qui rattrapent l'onde de choc et induisent une accélération du choc. L'onde de choc ainsi accélérée se propage et engendre dans l'explosif inerte une pression $P > P_i = P_{seuil}$. Ainsi, en se propageant dans l'explosif inerte, elle générera statistiquement davantage de points chauds dont les ondes de compression induites remonteront l'écoulement et l'accéléreront davantage. Le choc étant soutenu, ce phénomène se poursuit jusqu'à l'apparition d'une onde de détonation dans l'explosif. Dans cette configuration, on devrait avoir une profondeur de transition bien supérieure à celles observées dans les gammes de pression usuelles de TCD. En $P = P_{seuil}$, la profondeur de transition tend alors vers une valeur finie : à partir du moment où le premier point chaud apparaît dans l'explosif, l'onde de choc transitera en détonation à une profondeur donnée.

- **Asymptote pour des pressions élevées :**

Considérons désormais un impact générant une forte pression P_i dans l'explosif. D'un point de vue physique, si l'on impacte un explosif à une pression P_i égale à la pression de von Neumann P_{vN} , l'état de détonation serait directement atteint dans l'explosif et on aurait $x^* = 0$ mm (plus rigoureusement, x^* devrait être égal à l_c , la longueur caractéristique d'induction des réactions chimiques de détonation). On peut donc aisément se représenter l'existence d'une asymptote dans le Pop-Plot pour des pressions élevées. Il existe donc une pression pour laquelle la profondeur de transition de l'explosif est nulle. Du fait de la définition actuelle de la profondeur de transition, cette pression, notée P_{max} , diffère selon le critère de transition employé. Pour le critère utilisant une vitesse de référence D_{ref} , il s'agit de la pression nécessaire pour générer une onde de choc de vitesse $D_0 = D_{ref}$. Pour le critère de l'accélération maximale, il s'agit de la pression à partir de laquelle l'accélération du choc ne fait que diminuer. Pour le critère d'intersection des pentes, tant que les pentes associées au choc inerte et à l'onde de détonation diffèrent, *i.e.* tant que le choc accélère au cours de sa propagation, il est possible de trouver un point d'intersection entre ces deux pentes, et donc une profondeur de transition. La pression pour laquelle la profondeur de transition est nulle correspond donc à la pression pour laquelle l'onde de choc n'accélère plus et dont la trajectoire est une droite. Cela s'obtient donc lorsque l'impact induit dans l'explosif un état de détonation stationnaire^a, ce qui correspond à un impact de pression $P = P_{vN}$ induisant dans l'explosif une onde de choc de vitesse constante égale à D_{CJ} . Rien ne garantit cependant que ces trois pressions soient égales. La forme complète du Pop-Plot devrait donc avoir une forme se rapprochant de celles présentées en figure 3.6. À partir des considérations précédentes, il est difficile de définir une forme particulière de la portion à faible pression du Pop-Plot. Sur la figure 3.6, la forme de cette portion a été extrapolée à partir des Pop-Plots déterminés dans le

a. En supposant qu'aucune surdétonation n'est induite dans l'explosif.

cadre de la courbe unique de transition, que nous aborderons dans la section suivante.

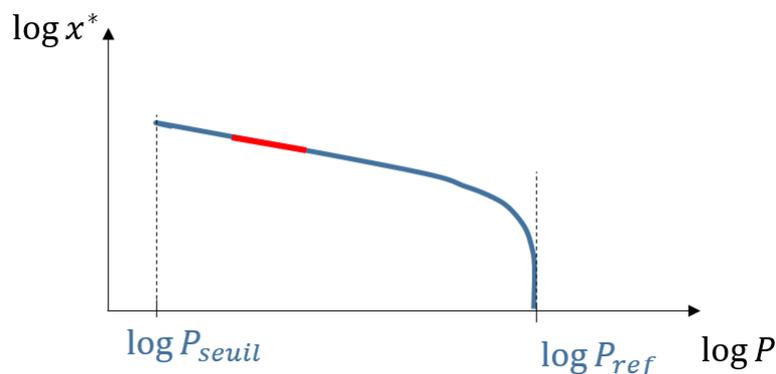


FIGURE 3.6 – Illustration de la forme complète d'un Pop-Plot. La portion rouge correspond à la plage de pression employée dans les Pop-Plot usuels, dans laquelle le Pop-Plot est assimilé à une droite.

Le critère de transition est donc toujours associé à une pression maximale P_{max} à partir de laquelle la profondeur de transition est nulle. Le Pop-Plot étant tracé en échelle logarithmique, celui-ci n'est défini que pour des pressions inférieures à cette pression maximale. Il est intéressant de noter que plus le critère de transition employé est associé à une pression maximale élevée, plus le Pop-Plot permet de représenter une plage de pression importante. Ainsi, pour que le Pop-Plot puisse regrouper le maximum d'informations, il serait judicieux de choisir le critère avec la pression maximale la plus importante. Cependant, comme vu en section 3.2, cela s'accompagne également d'un choix vis-à-vis de la précision recherchée. Bien que cette représentation du Pop-Plot résulte d'une expérience de pensée, elle est appuyée par des observations expérimentales où la variation non linéaire du Pop-Plot a été mise en évidence (figure 3.7.a et 3.7.b). Cette représentation est également justifiée par la forme des Pop-Plots pouvant être obtenus dans le cadre du principe de courbe unique de transition (voir figure 3.7.c et section 3.4). Sur la figure 3.7.c, le Pop-Plot est tracé en fonction de la vitesse initiale du choc : on parle alors de Pop-Plot cinématique.

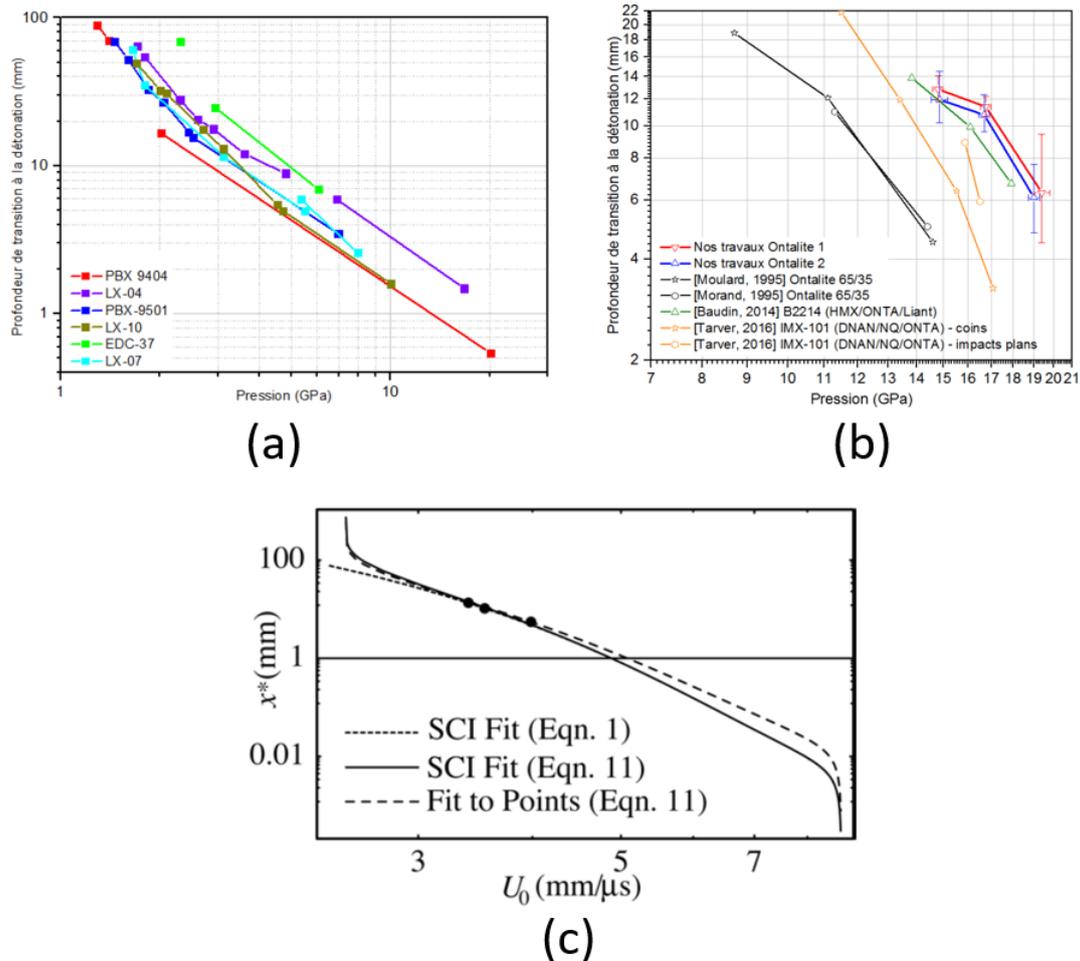


FIGURE 3.7 – Exemple de Pop-Plots pour des pressions faibles [77] (a), pour des pressions élevées [1] (b), obtenu dans le cadre de la courbe unique de transition [64] (c).

3.4 Principe de courbe unique de transition

Pour construire un Pop-Plot, il est nécessaire de réaliser plusieurs expériences de test du coin à différentes vitesses d'impact afin de mesurer l'évolution de la profondeur de transition en fonction de la pression d'impact. Cependant, Lindstrom [78] remarque, en 1966, que pour un même explosif, les diagrammes de marche obtenus à différentes pressions d'impact sont semblables. Il formule ainsi le principe de courbe unique de transition : pour un explosif donné, chaque diagramme de marche constitue une partie d'un unique diagramme de marche, à condition qu'ils soient centrés sur leur profondeur de transition (figure 3.8). Bien que le principe de courbe unique de transition n'ait pas été démontré théoriquement, il est observé expérimentalement [2]. Le principe de courbe unique de transition est particulièrement intéressant, puisqu'il permet d'obtenir le Pop-Plot d'un explosif à partir d'un seul test du coin.

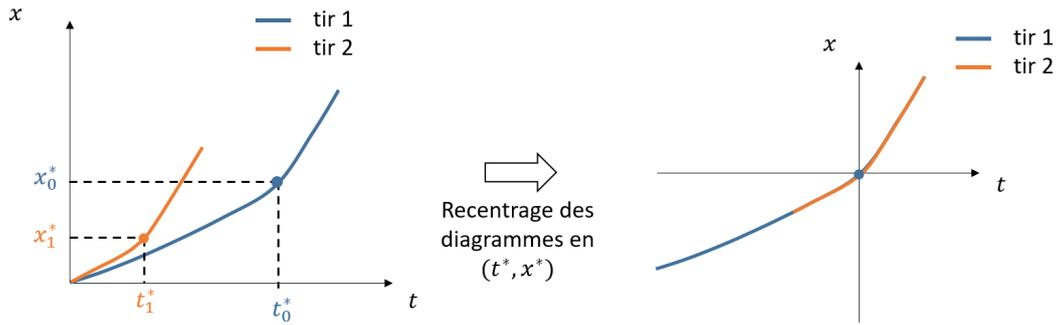


FIGURE 3.8 – Illustration du principe de courbe unique formulé par Lindstrom [78] et appliqué aux trajectoires des ondes de choc. t^* représente le temps de transition à la détonation.

3.4.1 Incompatibilité du critère d'intersection des pentes avec l'hypothèse de courbe unique de transition

L'hypothèse de courbe unique de transition, telle que formulée par Lindstrom [78], nécessite de recentrer le diagramme de marche dans le référentiel de transition. Or, le critère de transition associé à l'intersection des pentes, de par sa formulation, est incompatible avec le principe de courbe unique de transition. Pour démontrer cela, considérons un explosif pour lequel l'hypothèse de courbe unique de transition est vérifiée. Pour décrire l'évolution de la vitesse du choc dans l'explosif, nous utiliserons l'équation différentielle 3.3 avec des paramètres $a_m = 4.8 \cdot 10^9 \text{m}^2 \text{s}^{-1}$, $D_m = 5452 \text{m s}^{-1}$, $m_{DCJ} = 1.69$ et $m_{c_0} = 3.53$ fixés. Quatre diagrammes de marche sont alors générés à partir de cette équation, pour des ondes de choc de vitesses initiales D_0 égales à 4000m s^{-1} , 4500m s^{-1} , 5000m s^{-1} et 5500m s^{-1} . Ces diagrammes de marche sont présentés en figure 3.9.a. Pour le critère de transition associé à l'accélération maximale, on observe que les diagrammes de marche se superposent s'ils sont recentrés sur leur profondeur de transition (figure 3.9.b).

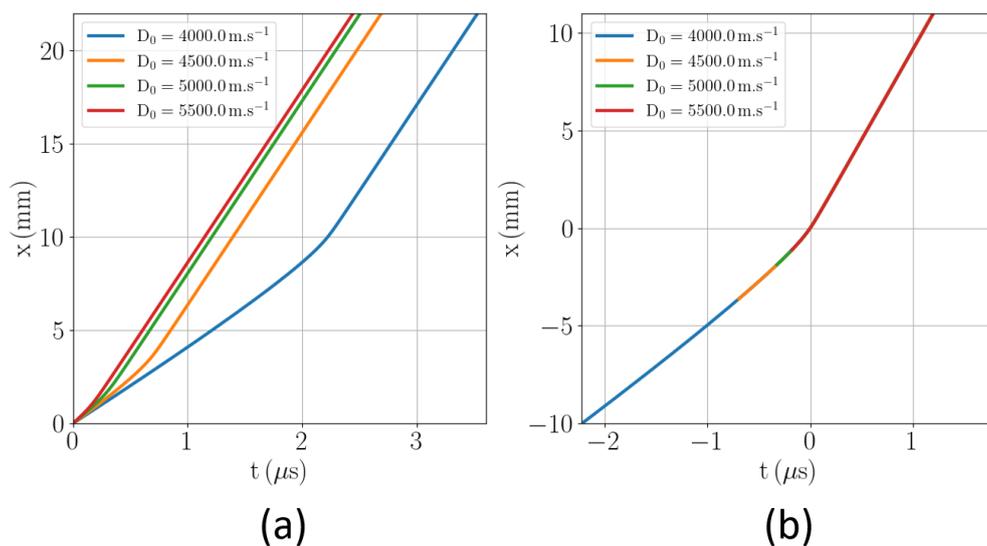


FIGURE 3.9 – Diagrammes de marche obtenus pour quatre vitesses de choc initial D_0 allant de 4000m s^{-1} à 5500m s^{-1} tracés dans le référentiel du laboratoire (a) et dans le référentiel associé au critère de transition d'accélération maximale (b)

En revanche, pour le critère de transition associé à l'intersection des pentes, les diagrammes de marche ne se superposent pas lorsqu'ils sont recentrés sur leur profondeur de transition (figure 3.10). L'utilisation du critère d'intersection des pentes ne permet donc pas de retrouver la courbe unique de transition en recentrant les diagrammes de marche sur leur profondeur de transition, quant bien même ceux-ci aient été obtenus à partir de la même équation différentielle. Cela est dû au fait que le principe de courbe unique de transition est vérifié dans un référentiel lié à l'onde de détonation. Comme le critère d'intersection des pentes est dépendant des conditions d'impact, les points de transition ne peuvent pas être rattachés à un référentiel particulier.

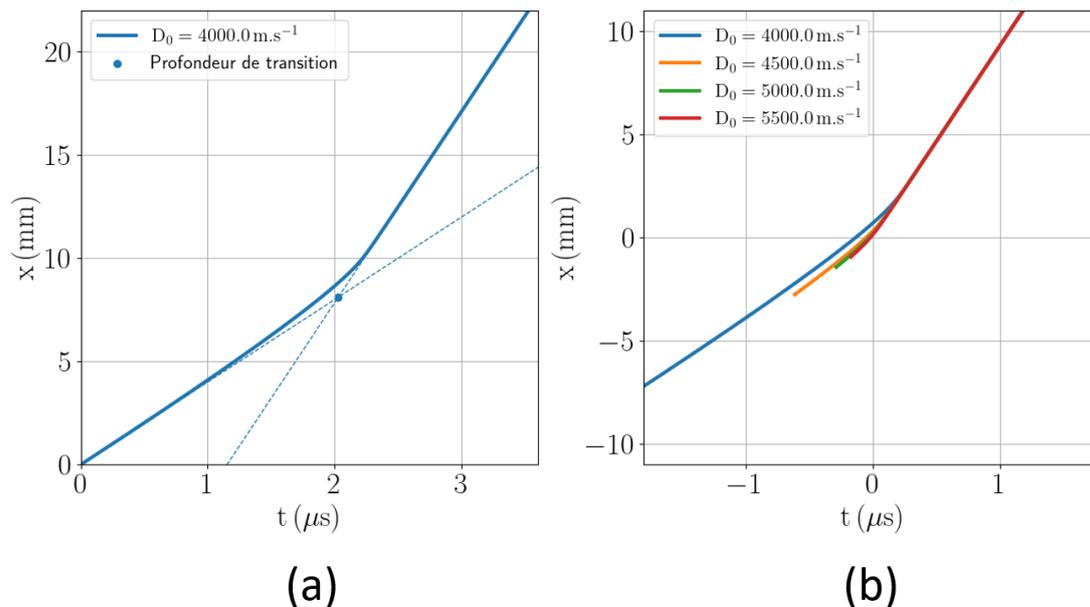


FIGURE 3.10 – Illustration de la méthode d'intersection des pentes pour le diagramme de marche réalisé avec une vitesse de choc initial $D_0 = 4000 \text{ m s}^{-1}$ (a). Diagrammes de marche obtenus pour quatre vitesses de choc initial D_0 allant de 4000 m s^{-1} à 5500 m s^{-1} tracés dans le référentiel associé au critère de transition d'intersection des pentes (b).

Dans la suite de cette partie, nous ne considérerons donc que le critère de transition associé à une vitesse de choc de référence et celui associé à une accélération maximale.

3.4.2 Interprétations théoriques et conséquences sur le Pop-Plot

Si le principe de courbe unique de transition est généralement formulé à partir du diagramme de marche, sa représentation dans le plan (x, D) est parfois employée [64]. Nous utiliserons cette représentation dans la suite de ce chapitre. Une illustration de cette formulation est présentée en figure 3.11.

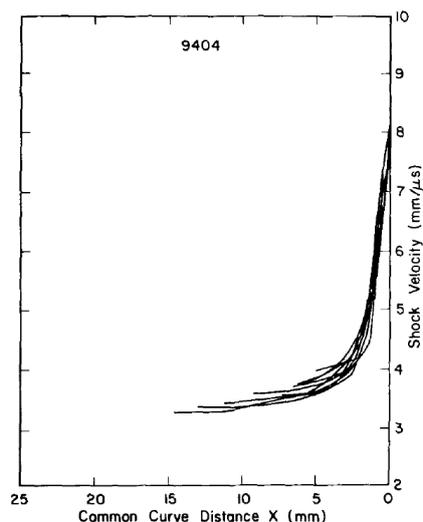


FIGURE 3.11 – Évolution spatiale de la vitesse du choc mesurée pour du PBX-9404 et tracée dans le repère de transition [79].

Les implications de la courbe unique sur le comportement d'un explosif sont importantes. En effet, cela signifie que si l'on mesure l'évolution de la vitesse du choc générée par deux tirs numérotés 1 et 2 induisant respectivement une onde de choc de vitesse initiale D_1 et $D_2 > D_1$, alors, en se plaçant dans le référentiel de transition, ces deux courbes se superposent (figure 3.12.a et 3.12.b). Chaque point de la courbe unique peut donc être vu comme le point de départ d'un test du coin virtuel. Pour un test du coin quelconque générant dans l'explosif un choc de vitesse initiale $D_i > D_1$, il est alors possible de déterminer l'évolution de la vitesse du choc dans l'explosif uniquement à partir de la courbe unique de transition. Le Pop-Plot devient accessible à partir d'un unique tir : pour un test du coin quelconque, la profondeur de transition est donnée par l'abscisse du point ayant cette vitesse D_i (figure 3.12.c). Le Pop-Plot ainsi obtenu est défini pour des pressions comprises entre P_i , la pression associée au choc de vitesse initiale D_i , et P_{max} , la pression maximale liée au choix du critère de transition employé.

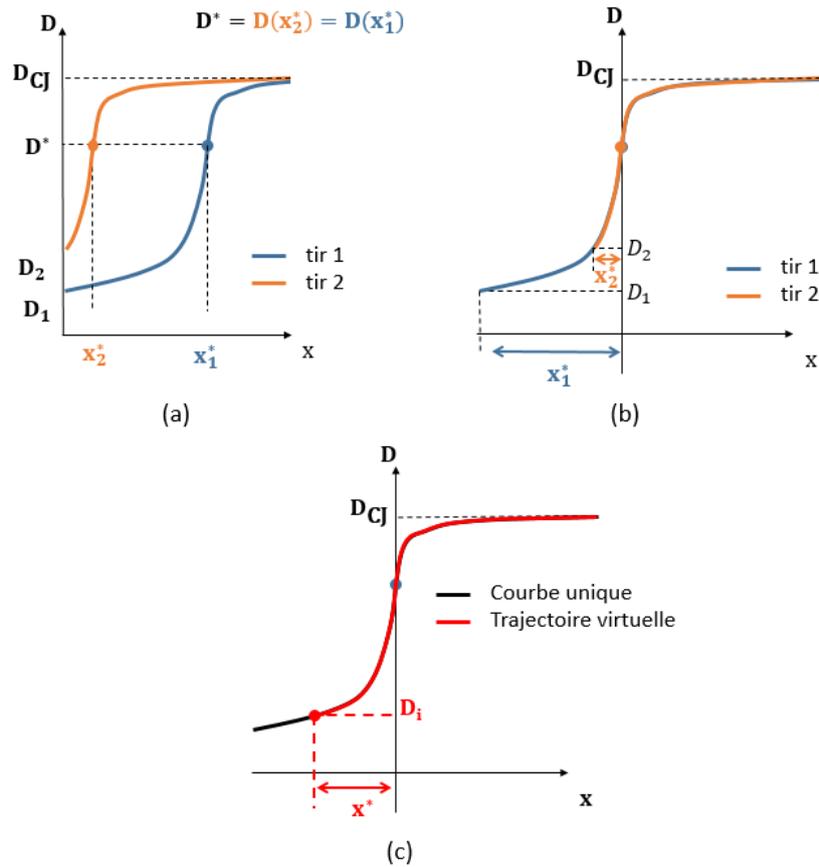


FIGURE 3.12 – Schéma illustratif du principe de courbe unique de transition. Évolution spatiale de la vitesse de choc pour deux tests du coin (a) Recentrage des profils dans le référentiel de transition (b) La courbe unique obtenue permet d'accéder à l'ensemble des profils qui seraient obtenus avec un test du coin virtuel (c).

- Interprétation du Pop-Plot dans le cadre de la courbe unique de transition :

Si l'on dispose de l'équation d'état de l'explosif inerte, alors, à partir de la courbe unique dans le plan (x, D) , il est possible d'obtenir la courbe unique de transition dans le plan (x, P_c) , où P_c correspond à la pression au choc (figure 3.13).

Il devient alors possible d'obtenir le Pop-Plot complet à partir de la courbe unique. Si l'on considère un test du coin virtuel induisant dans l'explosif une onde de choc dont la vitesse et la pression initiales sont notées D_i et P_i respectivement, alors la profondeur de transition x^* est reliée à la pression d'impact par la relation $P_i = P_c(x = -x^*)$. Dans cette représentation, la profondeur de transition peut être négative. Elle correspond alors à des tests du coin où l'onde de choc a déjà transité en détonation au moment de l'impact. Dans ce cas, la profondeur de transition donne la position, en amont du point d'impact, à laquelle l'onde de choc aurait transité si elle s'était propagée dans un explosif.

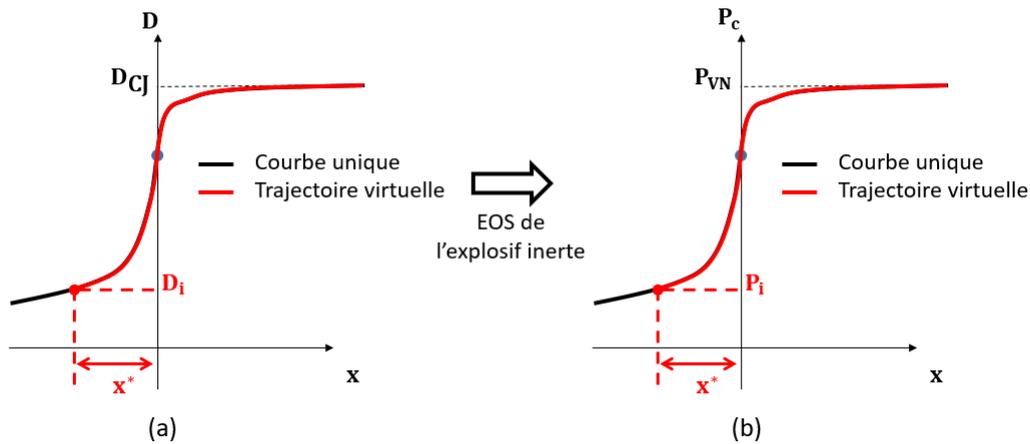


FIGURE 3.13 – Schéma illustrant le passage de (a) la courbe unique dans le plan (x, D) à (b) la courbe unique dans le plan (x, P_c) .

Avec la relation $P_i = P_c(x = -x^*)$, on retrouve donc le Pop-Plot, qui représente l'évolution de la profondeur de transition en fonction de la pression d'impact, généralement en échelle logarithmique. Par conséquent, le Pop-Plot, dans le cadre de la courbe unique de transition, correspond à l'évolution spatiale (ou plutôt l'évolution en fonction de $-x$) de la pression au choc, dans le référentiel associé au point de transition, et tracé en échelle logarithmique. Il y a donc une bijection entre le Pop-Plot et l'évolution de la vitesse du choc dans le cadre de la courbe unique de transition. Cette bijection n'est valable que tant que la vitesse de choc n'a pas atteint la vitesse de détonation stationnaire.

Pour des pressions élevées, la profondeur de transition est négative, et cette portion du Pop-Plot n'est alors plus représentée lorsqu'il est tracé en échelle logarithmique. Cette nouvelle visualisation du Pop-Plot est particulièrement intéressante, puisqu'elle permet d'interpréter les résultats expérimentaux de la littérature différemment. Dans le cadre du principe de courbe unique de transition, la notion de sensibilité au choc en termes de TCD revient donc à représenter comment l'onde de choc évolue tout au long de sa propagation dans l'explosif.

Inversement, il est possible de déterminer l'évolution de la vitesse de choc dans un explosif à partir de son Pop-Plot. Pour cela, prenons le Pop-Plot du HMX comprimé dont les mesures ont été réalisées de $P_{min} = 4.4$ GPa à $P_{max} = 9.6$ GPa. En traçant ce Pop-Plot dans le référentiel tel que $P(x = 0) = P_{min}$, on peut alors déterminer l'évolution spatiale de la pression d'un choc dont la valeur initiale aurait été de $P_i = P_{min}$ (figure 3.14 (b)). En couplant ce changement de référentiel à une équation d'état, il devient également possible de représenter l'évolution spatiale de la vitesse du choc (figure 3.14.c).

On constate alors que les Pop-Plots, tels qu'ils sont représentés actuellement, ne permettent de reconstruire l'évolution spatiale de la pression au choc que dans une gamme de pression restreinte. Si l'on suppose que le principe de courbe unique est généralisable, alors les Pop-Plots actuels rassemblent deux informations : l'évolution de la pression au choc, pour des pressions relativement faibles (ici $P < 9.6$ GPa), ainsi que la distance nécessaire à un choc de pression initiale P_{min} pour atteindre le critère de transition en détonation.

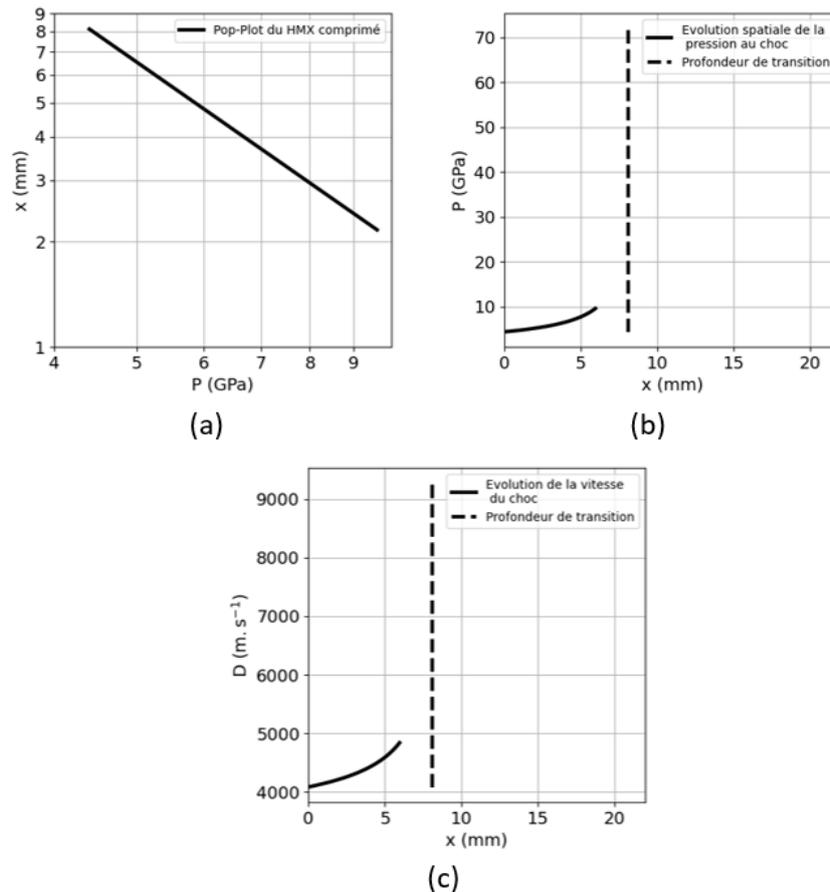


FIGURE 3.14 – Illustration du passage du Pop-Plot expérimental du HMX comprimé (a) à la courbe d'évolution spatiale de la pression au choc (b), puis à la courbe d'évolution spatiale de la vitesse du choc (c).

- Influence du critère de transition sur le Pop-Plot dans le cadre de la courbe unique de transition :

Comme nous avons pu le voir en section 3.2, la construction du Pop-Plot dépend du critère employé pour définir la profondeur de transition. Dans le cadre général, il est difficile d'établir dans quelle mesure ces variations impactent le Pop-Plot. Cependant, si l'on se place dans le cadre du principe de courbe unique de transition, il devient possible d'étudier comment le choix d'un critère de transition influe sur le Pop-Plot. Supposons que l'hypothèse de courbe unique de transition soit vérifiée et plaçons-nous dans le repère de transition associé au critère de l'accélération maximale de l'onde de choc. Pour représenter la courbe unique, un profil de vitesse de choc a été généré à l'aide de l'équation différentielle 3.3 (figure 3.15.a). Sur cette courbe, il est possible de placer le point x_1 vérifiant $D(x_1) = 0.99D_{CJ}$. L'hypothèse de courbe unique nous permet alors de tracer le Pop-Plot pour le critère d'accélération maximale et le critère de vitesse de référence à $0.99D_{CJ}$ (voir figure 3.15.b et 3.15.c).

On constate alors que pour passer du référentiel de transition associé au critère de l'accélération maximale à un autre référentiel de transition, il suffit de traduire la courbe d'évolution de la vitesse du choc par la constante x_1 (figure 3.15.a). Cette constante est spécifique à l'explosif considéré. Comme nous l'avons vu précédemment, dans le cadre de la courbe unique, tracer

un Pop-Plot revient à tracer l'évolution spatiale de la pression au choc dans le référentiel de transition. En échelle linéaire, le changement de référentiel de transition a donc également pour conséquence de translater le Pop-Plot par la constante x_1 . Comme le Pop-Plot est tracé en échelle logarithmique, ce déplacement s'accompagne d'une modification de sa pente (figure 3.15.c). Cette variation induite par l'utilisation d'un critère de transition plutôt qu'un autre est particulièrement importante lorsque les sensibilités de deux explosifs sont comparées car la pente des Pop-Plot est régulièrement employée comme indicateur de la sensibilité des explosifs [69, 75, 76]. La comparaison des Pop-Plots de deux explosifs, déterminés avec des critères de transition différents, peut donc amener à des conclusions erronées sur leurs sensibilités relatives.

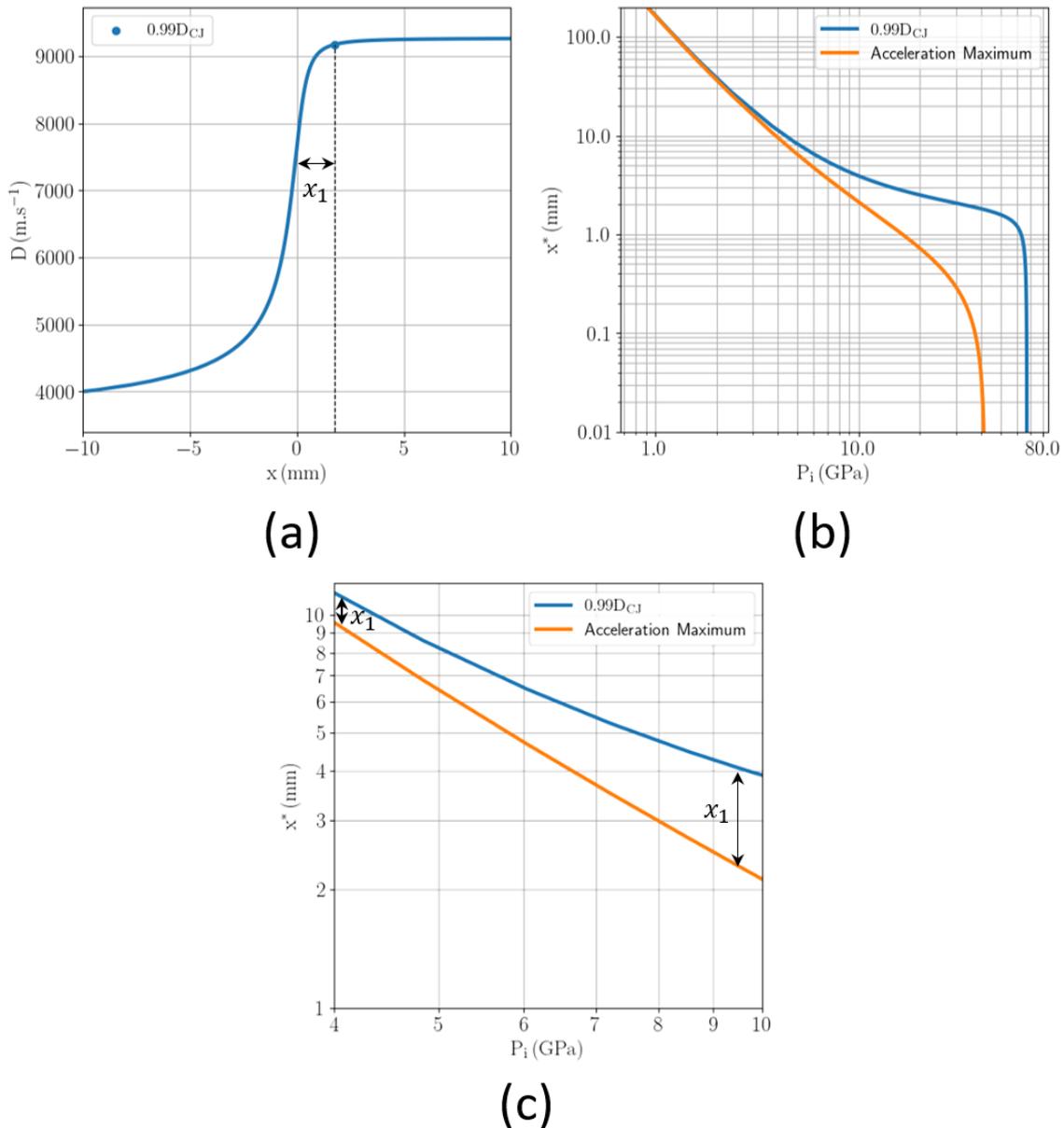


FIGURE 3.15 – Évolution de la vitesse de choc recentrée dans le référentiel associé au critère d'accélération maximale (a). Influence du critère de transition sur le Pop-Plot obtenu avec l'hypothèse de courbe unique (b). Zoom réalisé sur une gamme de pression usuelle (c).

Pour les critères nécessitant de réaliser une régression du diagramme de marche, il est également important que les comparaisons soient réalisées en utilisant la même forme d'équation différentielle pour l'accélération du choc [64].

- Interprétation physique de la courbe unique et limites du principe :

D'un point de vue physique, le principe de courbe unique impose que l'accélération d'un choc à un instant t ne dépend que de sa vitesse à cet instant. Les implications sont cependant délicates à appréhender et peuvent s'avérer problématiques dans la compréhension que l'on a de la TCD [64].

Pour illustrer cela, reprenons l'exemple avancé par Hill *et al.* [64]. Considérons deux échantillons d'un même explosif, que l'on notera respectivement A et B, soumis à un test du coin. Les tests du coin sont réalisés afin que l'onde de choc ait une vitesse initiale D_0 dans l'échantillon A, et une vitesse $D_1 > D_0$ dans l'échantillon B. Après un certain temps t_1 , l'onde de choc dans l'échantillon A aura accéléré du fait des ondes de compression générées par les points chauds, et aura atteint la vitesse D_1 . Nous noterons d_1 la distance parcourue par l'onde de choc pendant le temps t_1 dans l'échantillon A. Au même instant, une onde de choc de vitesse D_1 est générée dans l'explosif B. Une illustration de cet exemple est disponible en figure 3.16. Le principe de courbe unique implique que, à partir du temps $t = t_1$, l'onde de choc dans l'échantillon A se comporte exactement de la même façon que l'onde de choc dans l'échantillon B. Or, dans le cas de l'échantillon A, toutes les réactions chimiques présentes dans la zone de réaction participent à l'accélération du choc, tandis que dans l'échantillon B, seules les réactions directement au front de choc participent à son accélération. Par conséquent, l'accélération du choc dans l'échantillon B devrait donc être plus faible que celle dans l'échantillon A.

Ce phénomène devrait être cependant compensé par le fait qu'à $t = t_1$ l'onde de choc est soutenue dans l'échantillon B tandis que dans le cas de l'échantillon A, il devrait s'être formé un pic-détente. Les gradients de pression au front de choc dans l'échantillon A sont donc plus forts que dans l'échantillon B.

En effet, lors de la TCD, les gradients de pression au front de choc influencent également l'accélération induite. L'équation maîtresse d'évolution du choc, dont la démonstration est donnée dans les travaux de Chuzeville [1], s'exprime :

$$\frac{dD}{dt} = \frac{\rho c^2 M^2}{\left(\frac{dP}{dD}\right)_H (M^2 + \rho_0 D \left(\frac{du}{dP}\right)_H)} \left(\sigma \frac{d\lambda}{dt} - 2uC - \frac{1 - M^2}{\rho_0 D} \frac{\partial P}{\partial n} \right) \quad (3.4)$$

avec \vec{n} la normale au choc, $D_n = \vec{D} \cdot \vec{n}$ la célérité normale du choc, $u_n = \vec{u} \cdot \vec{n}$ la vitesse matérielle normale au choc, σ la thermicité donnée par $\sigma = \frac{1}{\rho c^2} \left(\frac{\partial P}{\partial \lambda}\right)_{\rho, e}$, C la courbure du choc et M son nombre de Mach donné par $M = \frac{D_n - u_n}{c}$.

Des gradients de pression importants au front de choc devraient donc induire une diminution de l'accélération du choc.

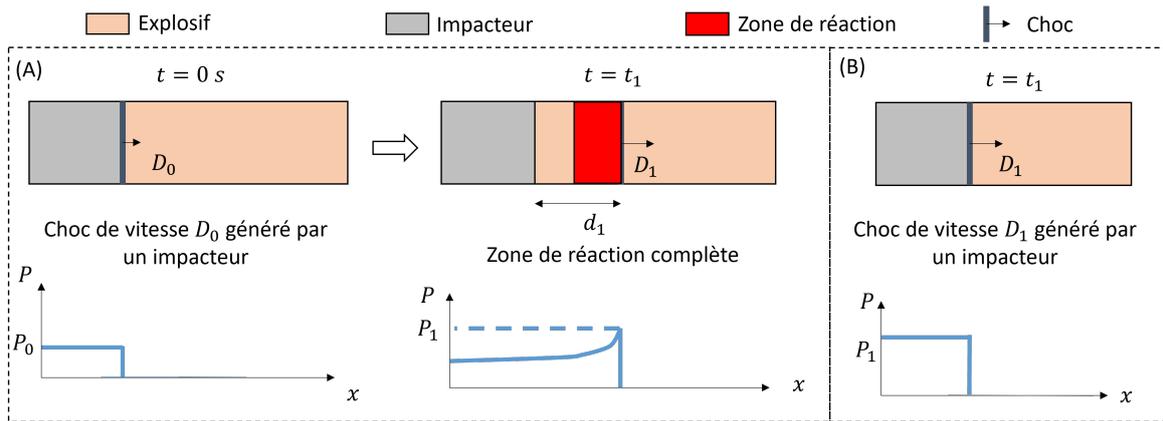


FIGURE 3.16 – Schéma illustratif de la limitation physique associée à la courbe unique de transition. Les signaux de pression associés à chaque temps sont également illustrés.

Une autre possibilité peut cependant être considérée : le principe de courbe unique ne devient valable qu'après que l'onde de choc ait parcouru une certaine distance.

Reprenons l'exemple présenté ci-dessus, et adaptons le à cette nouvelle considération (voir figure 3.17).

- À $t = 0$ s, un choc de vitesse initiale D_0 est induit dans l'échantillon A.
- À $t = t_1$, le choc a parcouru une distance d_1 dans l'échantillon A et a atteint une vitesse D_1 . Parallèlement, un choc de vitesse $D = D_1$ est généré dans l'échantillon B. À cet instant, il ne possède pas encore de zone de réaction pouvant l'accélérer.
- À $t = t_2$, l'onde de choc dans l'échantillon A a continué à se propager et à accélérer. Elle a ainsi atteint une vitesse D_2 et le gradient de pression au front du choc s'est intensifié. Pendant ce temps, l'onde de choc dans l'échantillon B s'est également propagée et a accéléré. Elle a désormais une vitesse \widetilde{D}_2 . Le gradient de pression au front de choc s'est développé mais il reste encore relativement faible. À $t < t_2$, la zone de réaction dans l'échantillon B est encore partiellement tronquée. Du fait de cette différence de zone de réaction et de gradients de pression, les vitesses D_2 et \widetilde{D}_2 sont différentes.
- À $t = t_3$, l'onde de choc dans l'échantillon A a encore accéléré et a atteint la vitesse D_3 . Dans l'échantillon B, cette vitesse est atteinte au temps $t = \widetilde{t}_3$. La zone de réaction est alors établie dans les deux échantillons. L'onde de choc dans l'échantillon A à partir de t_3 suit la même évolution que l'onde de choc dans l'échantillon B à partir de \widetilde{t}_3 .

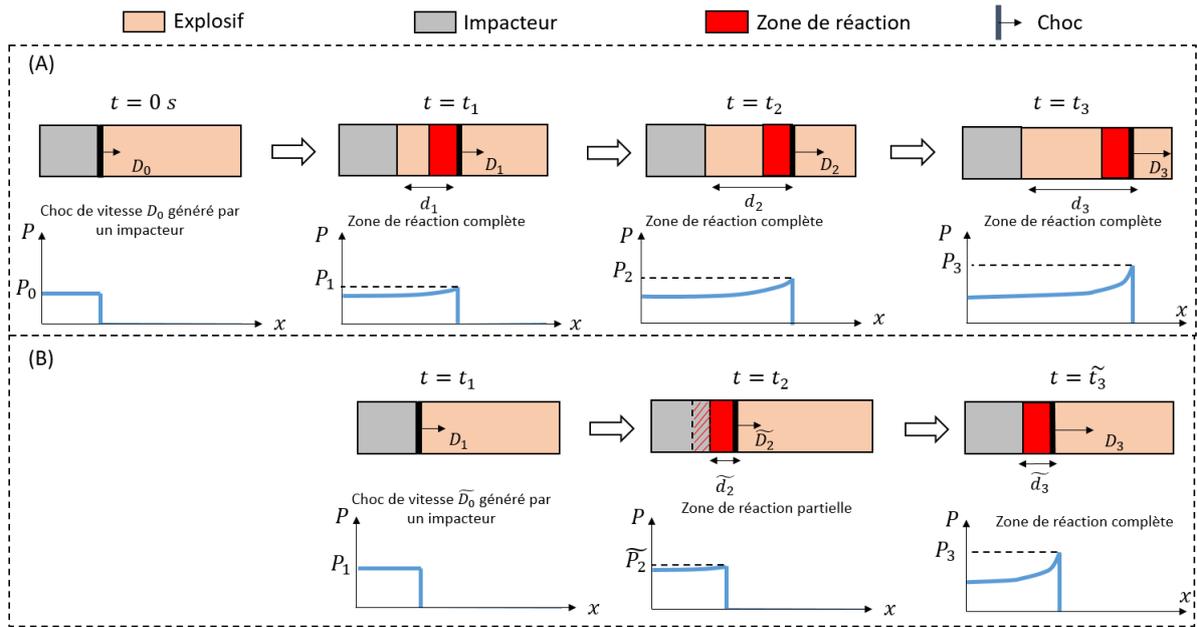


FIGURE 3.17 – Schéma illustratif montrant l'évolution d'une onde de choc formée par un impact de plaque dans deux échantillons d'un même explosif. Dans le cas (A), l'onde de choc formée possède une vitesse initiale D_0 et atteint une vitesse D_3 au bout d'un temps t_3 . Dans le cas (B), l'onde de choc formée possède une vitesse initiale D_1 et atteint une vitesse D_3 au bout d'un temps $(\tilde{t}_3 - t_1)$. Les signaux de pression associés à chaque temps sont également illustrés.

De t_1 à \tilde{t}_3 , la zone de réaction dans l'échantillon B est tronquée alors que celle de l'échantillon A est complète. Par conséquent, l'accélération de l'onde de choc dans l'explosif B sera plus faible que celle dans l'explosif A durant cette période. Cependant, cela pourrait être compensé par le fait que le gradient de pression au front de choc est plus faible dans l'échantillon B que dans l'échantillon A.

Dès lors, deux éventualités sont à considérer :

- soit le gradient de pression au choc prévaut sur les différences de zone de réaction. Pour $t \in [t_1, \max(t_3, \tilde{t}_3)]$, on a donc : $\left(\frac{dD}{dt}\right)_B(t) > \left(\frac{dD}{dt}\right)_A(t)$. À $t = t_2$, on aurait alors $D_2 < \tilde{D}_2$;
- soit ce sont les différences en termes de zone de réaction qui prévalent sur le gradient de pression au choc. Pour $t \in [t_1, \max(t_3, \tilde{t}_3)]$, on a donc $\left(\frac{dD}{dt}\right)_A(t) > \left(\frac{dD}{dt}\right)_B(t)$. À $t = t_2$, on aurait alors $D_2 > \tilde{D}_2$;

Une illustration de l'évolution spatiale de la vitesse de choc pour ces deux éventualités, est présentée en figure 3.18.

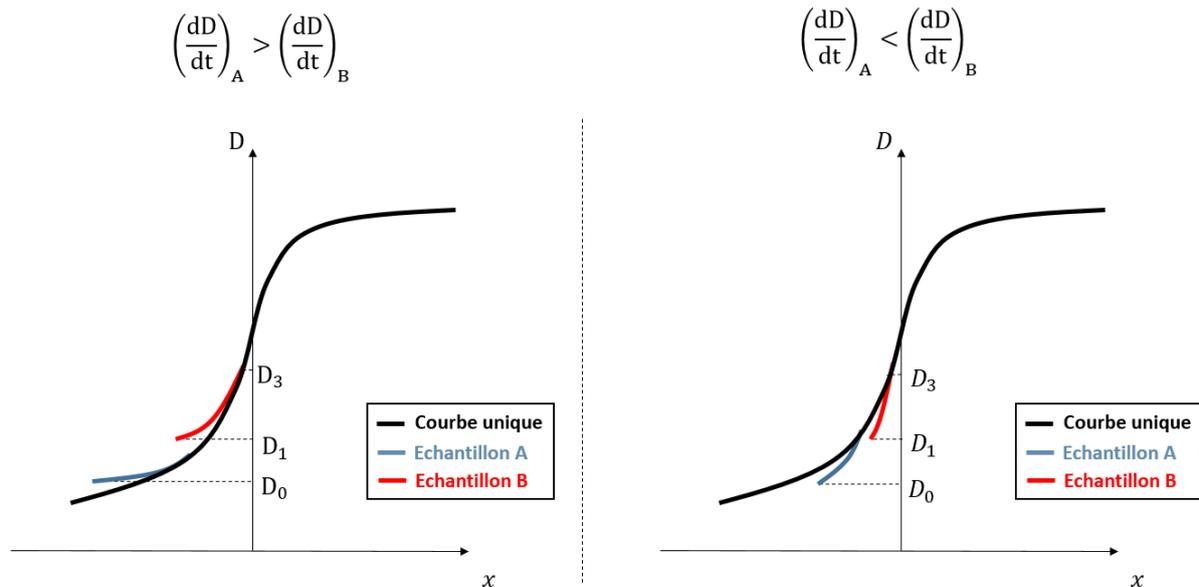


FIGURE 3.18 – Schéma illustrant l'évolution spatiale de la vitesse du choc si l'on suppose le principe de courbe unique de transition valide une fois la zone de réaction formée

Dans ce cadre, l'hypothèse de courbe unique ne serait donc valable qu'après que l'onde de choc ait parcouru une certaine distance, correspondant à la distance nécessaire pour que les différences en termes de zone de réaction et/ou de gradients de pression au choc se soient estompées. A priori, cette distance devrait être dépendante de la pression d'impact, et de l'explosif considéré. Dans la littérature, il est souvent fait l'hypothèse que l'influence des gradients de pression sur l'accélération du choc est négligeable [1]. Pour le cas de la figure 3.18, il est donc probable que les différences entre la courbe unique et les évolutions de choc puissent être considérées comme négligeables.

3.4.3 Application au PBX-9501

Au vu des considérations physiques développées précédemment, il semble difficile de justifier l'existence théorique de la courbe unique de transition. D'un point de vue pratique, le principe de courbe unique de transition a pu être observée pour plusieurs compositions [1, 2, 64, 78]. Il est donc possible qu'elle puisse être considérée comme étant valide compte tenu des incertitudes expérimentales [79]. Actuellement, le principe de courbe unique semble être une propriété peu connue des explosifs [80] et il n'y a que très peu de publications où il est clairement vérifié [1]. De plus, la détermination de l'existence ou de la non-existence d'une courbe unique de transition peut s'avérer particulièrement délicate, et doit être traitée avec précaution.

Dans deux études, l'une réalisée par Hill *et al.*[64], et l'autre par Elia *et al.* [81], des résultats expérimentaux issus de tests du coin ont été étudiés. Initialement, une régression du diagramme de marche était réalisée pour chacun des tests du coin afin de déterminer la profondeur de transition. En étudiant chacun des profils obtenus, on peut voir que l'évolution de la vitesse du choc varie en fonction des tirs réalisés (voir figure 3.19). Il peut alors être tentant de conclure à la non-existence de la courbe unique de transition.

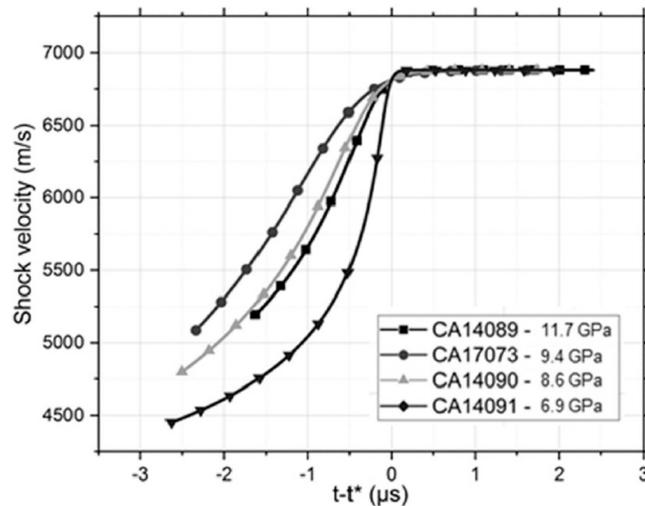


FIGURE 3.19 – Illustration de la non observation de la courbe unique par T. Elia *et al.* [81]

Cependant, lors d'une analyse approfondie des résultats expérimentaux obtenus, Hill *et al.* [64] et Elia *et al.* [81] ont montré qu'en changeant la méthode de post-traitement, il est possible de trouver une courbe unique permettant d'approcher chacun des tirs avec une très bonne précision. Afin d'illustrer ces problématiques, nous avons vérifié si l'hypothèse de courbe unique est valide pour le PBX-9501. Les données employées proviennent de la publication de Gustavsen *et al.* [55].

- Illustration de la problématique de courbe unique :

Dans les travaux de Gustavsen *et al.* [55] réalisés en 1999, cinq explosifs à base de HMX sont étudiés :

- trois PBX-9501 notés A, B et C, dont les masses volumiques initiales valent respectivement 1825 kg m^{-3} , 1830 kg m^{-3} et 1837 kg m^{-3} ;
- deux explosifs provenant de munitions nucléaires démantelées, notés W76 et W78, ayant été stockées pendant 124 mois et 201 mois respectivement. Ils possèdent la même masse volumique, égale à 1838 kg m^{-3} .

Chacun de ces explosifs a ensuite été soumis à un test du coin pour des pressions d'impact de 3.10 GPa, 3.90 GPa et 5.2 GPa. Les diagrammes de marche mesurés lors de ces essais sont utilisés afin de déterminer la profondeur de transition dans l'explosif pour les différents tests réalisés, et d'en déduire le Pop-Plot.

Afin de déterminer si le principe de courbe unique de transition est vérifié pour le PBX-9501, les diagrammes de marche mesurés par Gustavsen *et al.* [55] ont été ré-exploitées. Dans la suite de cette partie, nous nous focaliserons uniquement sur le PBX-9501 C. Le critère de transition employé pour calculer la profondeur de transition sera celui de l'accélération maximale du choc.

Pour chaque tir réalisé dans l'étude de Gustavsen *et al.* [55], une régression est donc réalisée avec l'équation différentielle 3.3. Son expression est rappelée ci-dessous :

$$a(t) = a_m \left(\frac{D_{CJ} - D(t)}{D_{CJ} - D_m} \right)^{m_{DCJ}} \left(\frac{D(t) - c_0}{D_m - c_0} \right)^{m_{c_0}} \exp \left(\frac{D(t) - D_m}{D_{CJ} - D_m} \right)$$

La figure 3.20 illustre le résultat d'une de ces régressions. On constate que le diagramme de marche est approché de manière satisfaisante. Les résidus obtenus pour ce tir valent en moyenne 0.02 mm, et aucun d'entre eux ne dépasse 0.07 mm. Ces valeurs sont du même ordre de grandeur que celles obtenues dans [55].

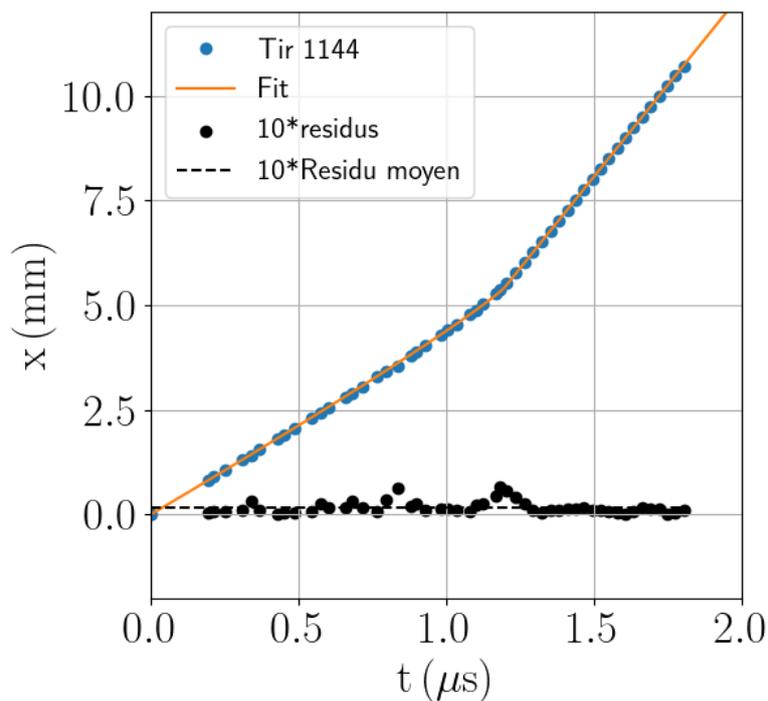


FIGURE 3.20 – Régression du diagramme de marche expérimental réalisée à partir du tir numéro 1144 issu de [55].

À partir de ces régressions, il est donc possible de déterminer la profondeur de transition obtenue pour chaque tir. Cependant, bien que les régressions permettent de reproduire les diagrammes de marche expérimentaux de chaque tir avec précision, ils ne se superposent pas lorsque qu'ils sont tracés dans le référentiel de transition (figure 3.21.a). Cette divergence est plus marquée si l'on observe l'évolution spatiale de la vitesse du choc, obtenue *via* les régressions, dans le référentiel de transition pour chacun des tirs (figure 3.21.b).

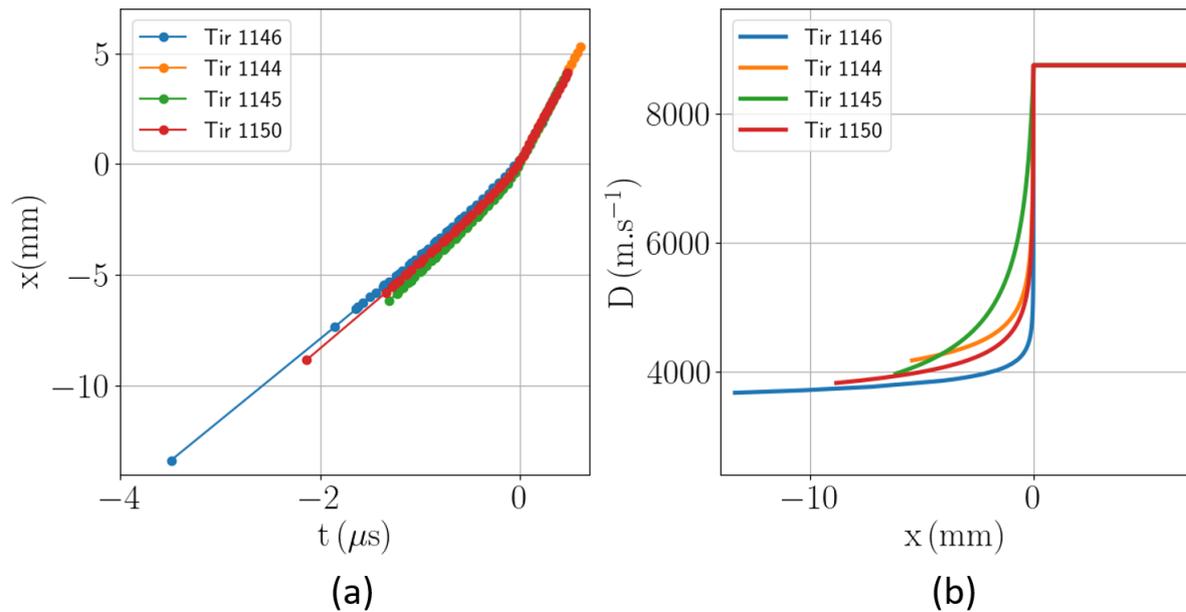


FIGURE 3.21 – Diagrammes de marche expérimentaux issus de [55] tracés dans le référentiel de transition (a) et évolution spatiale de la vitesse du choc dans ce même référentiel, déterminée à partir de la régression des différents diagrammes (b). La régression a été réalisée individuellement sur chacun des tirs.

Ces résultats pourraient laisser penser à une mise en défaut de l'hypothèse de courbe unique.

Cependant, si l'on observe les évolutions spatiales de la vitesse de choc pour les différents tirs, on remarque que celles-ci semblent similaires (figure 3.22).

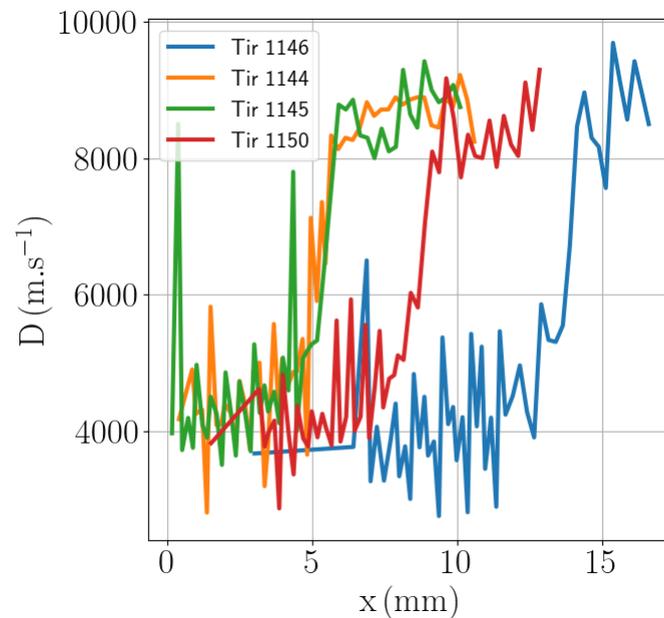


FIGURE 3.22 – Profils expérimentaux de l'évolution spatiale de la vitesse du choc issus de [55] et tracés dans le référentiel du laboratoire.

L'hypothèse de courbe unique de transition telle qu'elle est formulée stipule que les diagrammes de marche, lorsqu'ils sont tracés dans le repère associé au critère de transition, se superposent. Comme nous avons pu le voir (section 3.2), le choix du critère de transition relève davantage d'un choix arbitraire que d'un critère objectif. Par conséquent, pour pouvoir juger de l'existence d'une courbe unique de transition, il suffit de trouver un repère (x, t) dans lequel les diagrammes de marche se superposent. En traçant les diagrammes de marche dans un repère différent de celui employé précédemment, on constate que ceux-ci se superposent (figure 3.23). Le choix de ce nouveau repère a été réalisé manuellement et correspond au repère pour lequel la vitesse de l'onde de choc vérifie que $D(x = 0 \text{ mm}) = 8000 \text{ m s}^{-1}$.

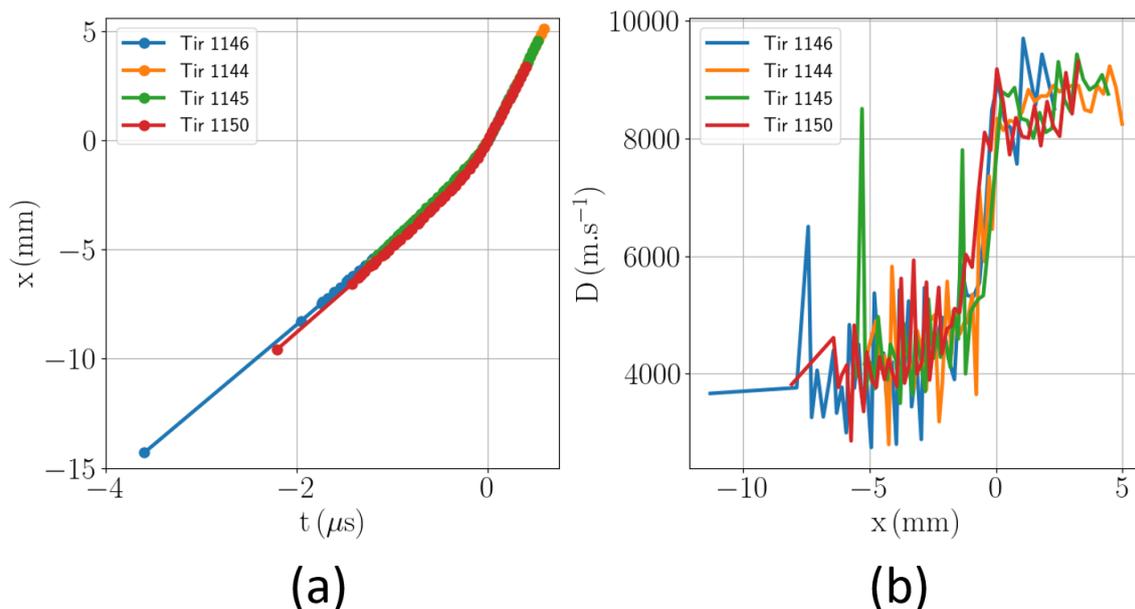


FIGURE 3.23 – Diagrammes de marche expérimentaux issus de [55] tracés dans un référentiel arbitraire permettant d'observer l'existence d'une courbe unique (a). Évolution spatiale de la vitesse du choc tracée dans ce même référentiel (b).

Ainsi, même si l'hypothèse de courbe unique de transition ne semblait pas être vérifiée initialement, il est tout de même été possible de trouver un repère dans lequel le principe de courbe unique est observé.

Changeons maintenant la méthode de post-traitement afin de valider l'hypothèse de courbe unique quantitativement.

Dans un premier temps, plaçons-nous dans le repère déterminé manuellement, dans lequel la courbe unique de transition a pu être observée (figure 3.23). Dans ce repère, les profils d'évolution spatiale de la vitesse du choc sont d'abord superposés en un profil unique. La régression est ensuite réalisée sur cet unique profil. On constate alors que la régression réalisée sur le profil unique permet de reproduire de manière satisfaisante le diagramme de marche de chacun des tirs. Les résidus obtenus, tous tirs confondus, valent en moyenne 0.08 mm, et aucun résidu ne dépasse 0.24 mm. La figure 3.24 présente les diagrammes de marche expérimentaux avec les résidus associés à l'emploi de cette courbe unique. Naturellement, les résidus obtenus en utilisant la courbe unique sont plus élevés que ceux obtenus lors d'une régression par tir. Néanmoins, elle

permet tout de même d’approcher avec une bonne précision les mesures expérimentales.

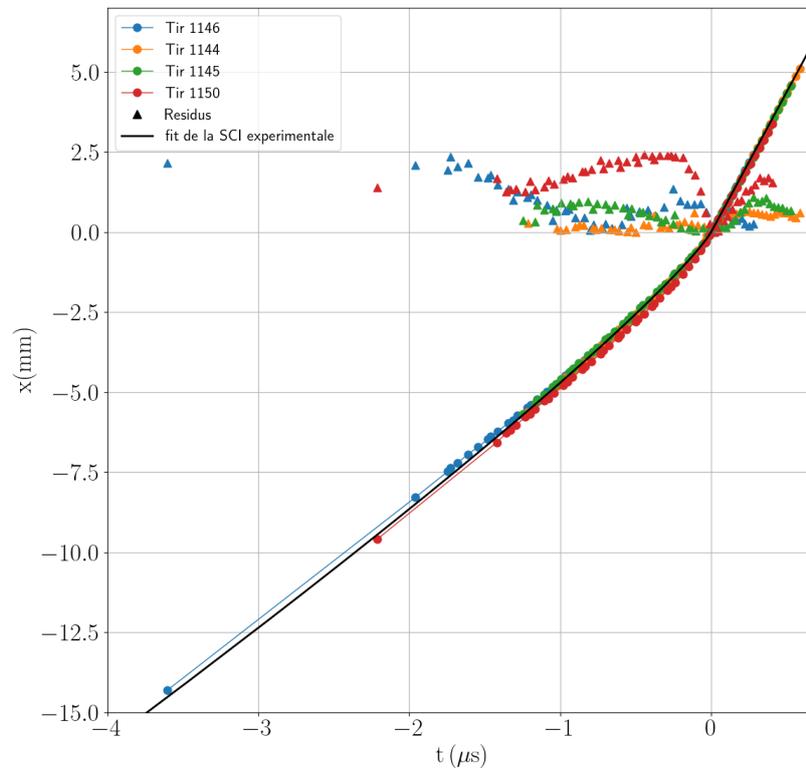


FIGURE 3.24 – Comparaison de la courbe unique obtenue à l’ensemble des diagrammes de marche expérimentaux issus de [55]. Les résidus associés à chaque tir sont représentés par les symboles triangulaires.

On constate donc que, selon le post-traitement réalisé, l’hypothèse de courbe unique de transition peut apparaître comme vérifiée ou non. Une attention particulière doit donc être portée à cette problématique. Dans la définition originelle de la courbe unique donnée par Lindstrom [78], il est mentionné que les diagrammes de marche, lorsqu’ils sont centrés au point de transition, se superposent en une courbe unique. Dans la pratique, cette définition se révèle plus délicate à appliquer. La détermination expérimentale de la courbe unique ne se résume pas à déterminer le point de transition de chaque tir pour recentrer leur diagramme de marche, mais à montrer l’existence d’une courbe permettant d’approcher avec précision le diagramme de marche de chacun des tirs réalisés. Dans les travaux d’Elia [2], une méthodologie avait été proposée afin de déterminer si l’hypothèse de courbe unique pouvait être considérée comme valide à partir d’un ensemble de tirs. À l’heure actuelle, il est probable que les mesures réalisées soient encore trop bruitées pour permettre de réellement trancher sur la validité de l’hypothèse de courbe unique. Le développement de métrologies plus précises ou l’augmentation du nombre de tirs réalisés dans les mêmes conditions pourraient permettre de mieux contraindre les régressions employées et de mieux juger de la validité de cette hypothèse.

3.5 Synthèse

Pour assurer le bon fonctionnement d'une munition, il est nécessaire de pouvoir déterminer la sensibilité au choc des explosifs employés. Cette thématique regroupe alors deux notions : la détermination du seuil d'amorçage, et l'étude de la Transition Choc-Détonation. Dans le cadre de cette thèse, nous nous focaliserons uniquement sur la sensibilité au choc en termes de TCD.

Pour caractériser la sensibilité au choc d'un explosif en termes de TCD, un graphique appelé Pop-Plot est généralement employé. Pour le déterminer, plusieurs expériences dites du test du coin sont réalisées à différentes pressions d'impact afin de mesurer la profondeur de transition à une pression de sollicitation donnée. La profondeur de transition représente la profondeur à laquelle une onde de choc soutenue évolue en détonation. Bien qu'elle soit largement employée pour caractériser la sensibilité au choc des explosifs, il n'existe pas de définition standardisée de la profondeur de transition et elle correspond davantage à un critère arbitraire pour quantifier la TCD. Malgré cette absence de standardisation, on retrouve usuellement trois critères dans la détermination de la profondeur de transition : le critère d'intersection des pentes, le critère de vitesse de référence, et le critère d'accélération maximale. Historiquement, le critère d'intersection des pentes était généralement utilisé, mais il s'est révélé peu précis et dépendant de l'opérateur. Les critères utilisant une régression du diagramme de marche (critères de vitesse de référence et d'accélération maximale) semblent être les plus précis. Du fait de la diversité des critères pouvant être employés pour définir la profondeur de transition d'un explosif, les Pop-Plots doivent être utilisés avec précaution pour juger de la sensibilité d'un explosif. La comparaison des Pop-Plots de deux explosifs, déterminés avec des critères de profondeur de transition différents, peuvent amener à des conclusions erronées sur leurs sensibilités relatives. Pour les critères nécessitant de réaliser une régression du diagramme de marche, il est également important que les comparaisons soient réalisées en utilisant la même forme mathématique pour l'accélération du choc [64]. Au vu de toutes ces considérations, il semble primordial d'adopter un critère de transition et une forme mathématique pour l'accélération du choc qui soient tous deux standardisés afin d'éviter tout biais dans les comparaisons de Pop-Plot.

Généralement, les Pop-Plots sont représentés comme étant linéaires en échelle logarithmique. Cependant, cette représentation linéaire n'est valide que pour une gamme de pressions restreinte. Pour des pressions très faibles et des pressions très élevées, le Pop-Plot tend vers des grandeurs finies, et ne peut plus être assimilé à une droite en échelle logarithmique.

Pour construire un Pop-Plot, il est nécessaire de réaliser plusieurs expériences de test du coin à différentes vitesses d'impact afin de mesurer l'évolution de la profondeur de transition en fonction de la pression d'impact. Dans ce cadre, le principe de courbe unique de transition est particulièrement intéressant. Il stipule que, pour un explosif donné, chaque diagramme de marche constitue une partie d'un unique diagramme de marche, à condition qu'ils soient centrés sur leur profondeur de transition. Ainsi, il serait possible d'obtenir le Pop-Plot d'un explosif à partir d'un seul test du coin. Bien que la courbe unique n'ait pas été démontrée théoriquement, elle est observée expérimentalement pour plusieurs explosifs.

Les conséquences de l'hypothèse d'une courbe unique de transition sont particulièrement importantes. En effet, si cette hypothèse est vérifiée, alors le Pop-Plot est une bijection de l'évolution de la vitesse du choc, tant que le choc n'a pas atteint une vitesse stationnaire. Par conséquent, étudier la sensibilité au choc d'un explosif revient à déterminer comment l'onde de choc évolue tout au long de sa propagation dans l'explosif. La trajectoire d'une onde de choc dans un explosif devient une propriété caractéristique du matériau. Si l'on suppose que le principe de courbe unique est généralisable, alors les Pop-Plots actuels rassemblent deux informations : l'évolution de la pression au choc, pour des pressions faibles, ainsi que la distance nécessaire à un choc d'une pression P_{min} (pression d'impact minimale définie dans le Pop-Plot) pour atteindre le critère de transition en détonation. Les figures 3.25.a et 3.25.b fournissent un récapitulatif des étapes permettant d'accéder au Pop-Plot à partir de la courbe unique et inversement.

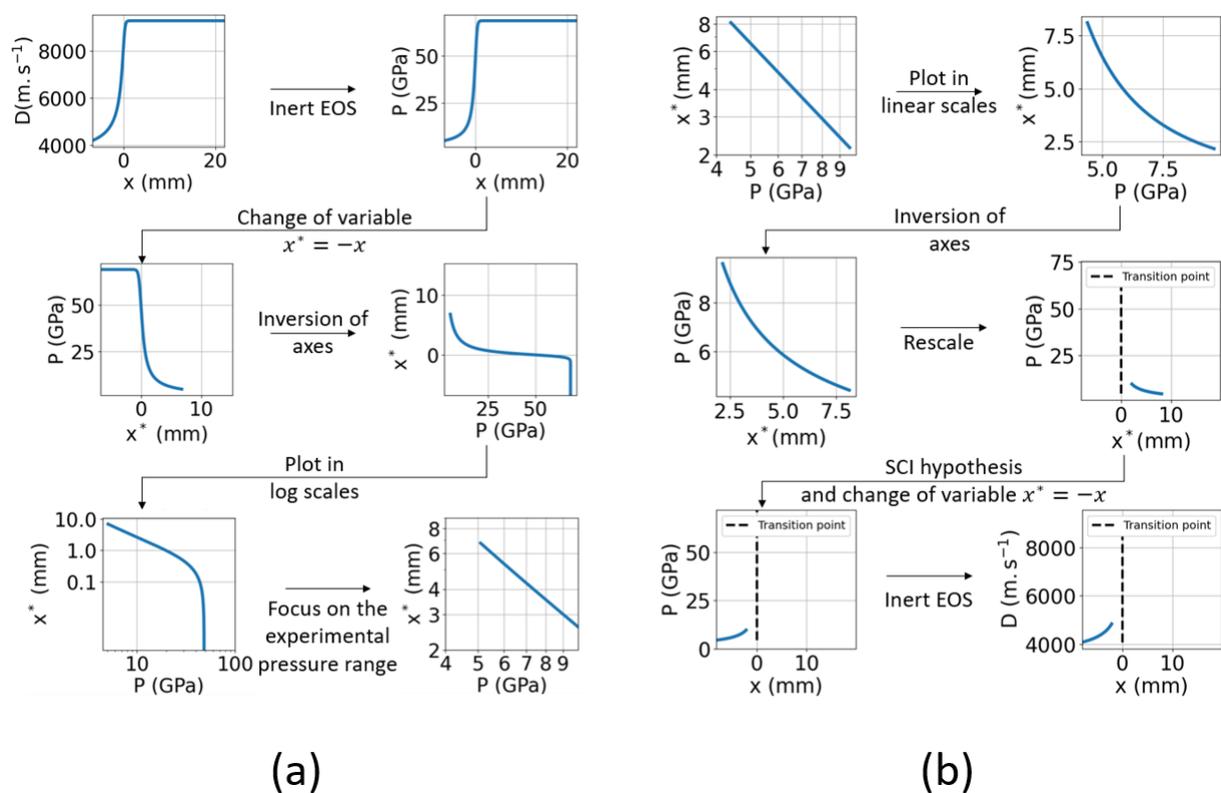


FIGURE 3.25 – Schéma récapitulatif des étapes nécessaires pour passer de la courbe unique de transition au Pop-Plot (a) et inversement (b).

Dans le cadre de la courbe unique de transition, il devient également possible de juger de l'influence du critère de transition sur le Pop-Plot. Ainsi, pour un explosif donné, le changement de critère de transition (hors critère d'intersection des pentes) revient à traduire le Pop-Plot en échelle linéaire. En échelle logarithmique, cette traduction s'accompagne d'une évolution de la pente du Pop-Plot.

D'un point de vue physique, les conséquences de la courbe unique de transition sont plus délicates à appréhender et il semble difficile de justifier de son existence théorique. D'un point de vue pratique, le principe de courbe unique de transition a pu être observé pour plusieurs compositions et il est donc possible qu'il puisse être considéré comme étant valide compte tenu

des incertitudes expérimentales actuelles [79].

Malgré ces observations, il n'y a que peu de publications dans lesquelles le principe de courbe unique de transition est clairement vérifié [1]. De plus, la détermination de son existence, ou sa non-existence peut s'avérer être particulièrement délicate et doit être traitée avec précaution. À partir des résultats expérimentaux obtenus par Gustavsen [55], nous avons pu voir que, selon la méthode de post-traitement utilisée, l'hypothèse de courbe unique était vérifiée ou non. Une attention particulière doit donc être portée à cette problématique. En effet, si le post-traitement est réalisé sur chacun des tirs indépendamment, il est probable que la courbe unique ne soit pas observée. Pour autant, comme l'avait montré Elia *et al.* [81], il reste possible de trouver une courbe unique si le post-traitement est réalisé sur l'ensemble des tirs. À l'heure actuelle, les mesures expérimentales semblent encore trop bruitées pour que l'on puisse trancher sur la validité de l'hypothèse de la courbe unique. De plus, la détermination de la courbe unique repose sur l'emploi d'une forme mathématique de l'accélération du choc. Une attention particulière doit donc être portée sur la capacité de cette formulation à restituer les diagrammes de marche expérimentaux. L'emploi d'une formulation invalide pourrait amener à des conclusions erronées lors la vérification de la courbe unique.

Comme nous avons pu le voir, les conséquences de l'existence ou non d'une courbe unique de transition sur la compréhension et l'interprétation des phénomènes de TCD sont importantes. Par conséquent, il semble primordial d'établir une méthodologie afin de garantir que la non-existence d'une courbe unique ne résulte pas d'un effet du post-traitement.

Pour conclure ce chapitre, il est important de souligner ce besoin d'uniformisation des pratiques vis-à-vis de l'étude de la Transition Choc-Détonation des explosifs. Sans cette uniformisation, l'évaluation de la sensibilité des explosifs sera contrainte par la disponibilité de Pop-Plots déterminés suivant la même méthodologie, ce qui peut engendrer une perte d'information conséquente. Dans le pire des cas, si l'évaluation de la sensibilité des explosifs est réalisée indépendamment de cette méthodologie, elle pourrait amener à des conclusions et à des interprétations erronées à propos des phénomènes étudiés. Il semble également important que la détermination du Pop-Plot soit accompagnée d'une vérification systématique de l'existence de la courbe unique. Cet enjeu est double. D'une part, il permettra ainsi de juger dans quelle mesure le principe de courbe unique est généralisable. D'autre part, si un explosif vérifie l'hypothèse de courbe unique, alors il est possible d'accéder à la quasi-totalité de son Pop-Plot. Les informations obtenues sont alors bien plus riches que pour un Pop-Plot "usuel".

À long terme, si l'on constate que l'hypothèse de courbe unique est généralisable, il pourrait être intéressant de concevoir des protocoles expérimentaux afin de la déterminer [80], à l'image des travaux de Elia *et al.* [81]. La courbe unique, en tant que propriété intrinsèque de l'explosif [80], pourrait être employée pour caractériser la sensibilité des explosifs. En effet, elle contient toutes les informations nécessaires à la détermination du Pop-Plot dans sa globalité tout en étant indépendante du critère de transition.

Modélisation de la TCD

Sommaire

4.1	L'approche macroscopique	64
4.1.1	Modèles de première génération	65
4.1.2	Modèles de deuxième génération	66
4.1.3	Modèles de troisième génération	69
4.2	Vers des modèles de quatrième génération : l'approche mésoscopique	70
4.2.1	Les prémices	72
4.2.2	Étude des seuils d'amorçage	73
4.2.3	Étude de la TCD	88
4.3	Modèles hybrides	97
4.4	Synthèse	98

Dans leurs travaux, Chuzeville [1] et Elia [2] ont adopté une classification des modèles de TCD en trois générations, chacune ayant apporté une évolution dans sa représentation. Aujourd'hui, une quatrième génération est en train d'émerger : l'approche mésoscopique. Au sein même de cette nouvelle génération, deux courants complémentaires ont vu le jour. Le premier se focalise sur l'étude des mécanismes de formation des points chauds. Il vise à déterminer les mécanismes les plus susceptibles d'engendrer des réactions chimiques dans l'explosif. Le second courant, quant à lui, se focalise sur la TCD. L'objectif est alors de mieux comprendre comment les points chauds contribuent à la transition du choc en détonation et de quantifier leur influence sur la sensibilité des explosifs. Une représentation du développement des modèles de TCD sous la forme d'une frise chronologique avait été proposée par Chuzeville [1] et Elia [2]. Cette représentation est reprise sur la figure 4.1, et complétée par les deux courants rencontrés dans l'approche mésoscopique.

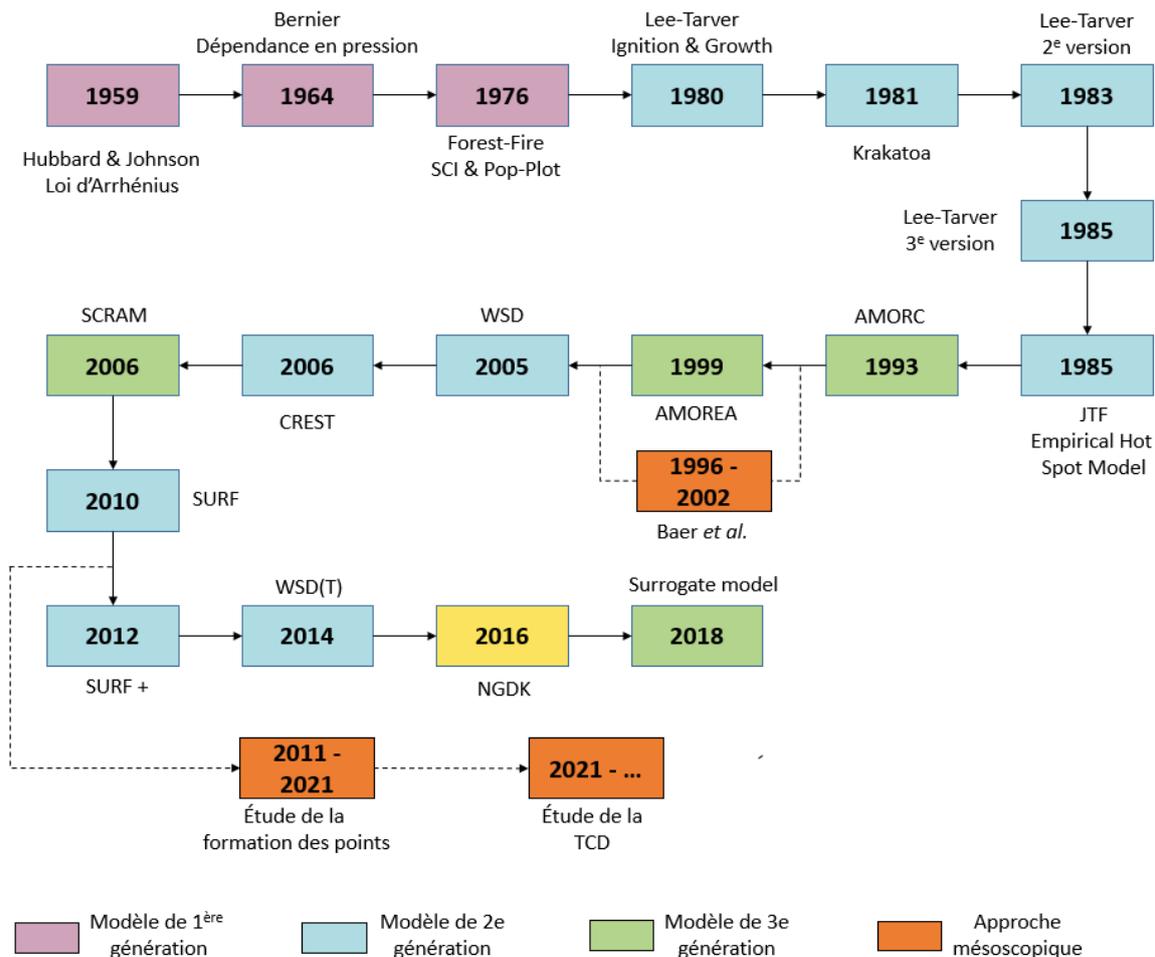


FIGURE 4.1 – Frise chronologique du développement des modèles de TCD pour les explosifs solides, issue de [1, 2] et complétée pour les besoins du manuscrit.

4.1 L'approche macroscopique

Comme nous avons pu le voir dans le chapitre 2, le premier modèle de TCD a été établi par Hubbard et Johnson [25]. Ce modèle a posé les bases de la représentation de la transition choc-détonation, et est constitué [2, 7] :

- d'une représentation du mouvement du matériau énergétique grâce aux équations de la dynamique (sans viscosité et sans transfert thermique),
- d'une relation de fermeture thermodynamique obtenue grâce à une équation d'état pour le mélange {explosif non réagi, produits de détonation},
- d'un modèle réactif de la décomposition de l'explosif en prodets décrit par une seule réaction chimique (Explosif \rightarrow Prodets).

En 1964, cette approche est complétée par les travaux de Bernier [82], qui remplace l'équation d'état du mélange "explosif non réagi/prodets" par une équation d'état pour chaque phase ainsi qu'une loi de mélange. Cette loi de mélange est nécessaire à la fermeture du système qui

emploie désormais deux équations d'état. Bernier [82] modifie également la cinétique employée en considérant un modèle réactif dépendant de la pression plutôt que de la température. Par la suite, ces améliorations seront employées comme base pour la plupart des modèles de TCD.

4.1.1 Modèles de première génération

Les premiers modèles de TCD adoptent une description empirique de la cinétique des explosifs. La notion de points chauds ne transparait pas encore dans leur expression. L'un des modèles les plus célèbres est celui de Forest-Fire [83], qui a été largement utilisé pour modéliser la TCD des explosifs.

L'évolution de la fraction massique de produits de réaction est supposée dépendante de la pression et décrite par la relation :

$$\dot{\lambda} = (1 - \lambda)f(P) \quad (4.1)$$

où f est une fonction de la pression. Dans la publication originale de Mader et Tarver [83], aucune hypothèse n'est réalisée quant à l'expression de la fonction f . Ce n'est que lors de son implémentation dans un code de calcul que la fonction est programmée sous la forme :

$$f(P) = \exp\left(A_0 + A_1P + A_2P^2 + \dots + A_nP^n\right) \quad (4.2)$$

où les coefficients A_i sont des paramètres de calibration.

Plus tard, Johnson *et al.* [84] précisent que la fonction f peut être approximée par le polynôme :

$$f(P) = A\left(\frac{P}{P_0}\right)^n \left(1 + B\left(\frac{P}{P_0}\right)^{7-n}\right) \quad (4.3)$$

où A , B et n sont les paramètres de calibration.

Les paramètres de la fonction f sont déterminés à partir du Pop-Plot. Pour les obtenir, cela nécessite de faire l'hypothèse que :

- les gradients de pression au front de choc sont négligeables ;
- le principe de courbe unique est vérifié.

Le modèle de Forest-Fire a été largement décliné afin de prendre en compte la dépendance de la vitesse de détonation à la courbure. Cependant, l'une des limitations du modèle de Forest-Fire réside dans son incapacité à modéliser les phénomènes de désensibilisation des explosifs et de contournements.

Plus récemment, Chuzeville [1] a développé une méthode permettant de déterminer la cinétique d'un explosif à partir de l'équation d'évolution du choc. L'expression de cette équation est :

$$\frac{dD_n}{dt} = \frac{\rho c^2 M^2}{\left(\frac{dP}{dD_n}\right)_H \left(M^2 + \rho_0 D_n \left(\frac{du_n}{dP}\right)_H\right)} \left(\sigma \frac{d\lambda}{dt} - 2u_n C - \frac{1 - M^2}{\rho_0 D_n} \frac{\partial P}{\partial n} \right) \quad (4.4)$$

avec \vec{n} la normale au choc, $D_n = \vec{D} \cdot \vec{n}$ la célérité normale du choc, $u_n = \vec{u} \cdot \vec{n}$ la vitesse matérielle normale au choc, σ la thermicité donnée par $\sigma = \frac{1}{\rho c^2} \left(\frac{\partial P}{\partial \lambda} \right)_{\rho, e}$, C la courbure du choc et M son nombre de Mach du choc donné par $M = \frac{D_n - u_n}{c}$.

On peut définir la fonction F , ne dépendant que de l'équation d'état de l'explosif inerte :

$$F(D) = \frac{\rho c^2 M^2}{\left(\frac{dP}{dD}\right)_H \left(M^2 + \rho_0 D \left(\frac{du}{dP}\right)_H\right)} \quad (4.5)$$

Pour un choc plan ($C = 0$), et en négligeant les gradients au front de choc ($\frac{\partial P}{\partial n} = 0$), l'équation se simplifie par :

$$\frac{dD}{dt} = F(D) \sigma \frac{d\lambda}{dt} \quad (4.6)$$

Il est alors possible d'exprimer la fonction f à partir de l'accélération du choc. Le détail complet de cette méthode d'inversion est disponible dans la thèse de Chuzeville [1].

4.1.2 Modèles de deuxième génération

Avec la deuxième génération de modèles de TCD, la cinétique de l'explosif intègre une description plus physique des réactions. Désormais, la contribution des points chauds est explicitement décrite dans les cinétiques. L'explosif étant modélisé comme un matériau homogène, leur prise en compte se traduit par l'ajout de paramètres numériques qui doivent alors être ajustés à partir de données expérimentales.

Les modèles de type Ignition & Growth (I&G)

Dans les modèles de type I&G, la cinétique de l'explosif est décomposée en plusieurs termes : un terme pour modéliser l'amorçage des points chauds (*Ignition*) et un autre terme pour modéliser leur croissance (*Growth*).

L'un des modèles les plus connus de cette lignée est celui de Lee-Tarver [85]. Il consiste à modéliser les réactions chimiques dans l'explosif par :

$$\dot{\lambda} = \underbrace{I(1-\lambda)^a \left(\frac{\rho}{\rho_0} - 1\right)^b}_{\text{Ignition}} + \underbrace{G(1-\lambda)^a \lambda^c P^d}_{\text{Growth}} \quad (4.7)$$

où I , G , a , b , c , et d sont des paramètres ajustables, dont certains peuvent être fixés selon le mécanisme de points chauds considéré.

Malgré la nécessité de calibrer le modèle, les paramètres du modèle sont désormais dotés d'une signification physique. Le terme d'amorçage vise à retranscrire la formation des points chauds en introduisant une dépendance au facteur de compression relative induit par le choc $\frac{\rho}{\rho_0} - 1$. Le terme de croissance a pour objectif de modéliser la propagation des fronts de déflagration issus des points chauds. Ainsi, le produit GP^d s'apparente à un rapport S/V multiplié par une vitesse de flamme laminaire sous la forme d'une loi de Vieille $D_f = AP^n$.

Par la suite, un terme de coalescence a été rajouté par Tarver *et al.* [86] afin de mieux retranscrire la TCD des explosifs pour des chocs non soutenus. Le modèle réactif comprend alors douze paramètres et s'exprime sous la forme :

$$\dot{\lambda} = \underbrace{I(1-\lambda)^b \left(\frac{\rho}{\rho_0} - 1 - a\right)^x}_{\text{Ignition}} + \underbrace{G_1(1-\lambda)^c \lambda^d P^y}_{\text{Growth}} + \underbrace{G_2(1-\lambda)^e \lambda^g P^z}_{\text{Coalescence}} \quad (4.8)$$

où I , G_1 , G_2 , a , b , c , d , e , g , x , y , et z sont les paramètres à ajuster.

Avec ce nouveau modèle, les auteurs obtiennent une bonne restitution des observations expérimentales pour le PBX-9404. Cependant, la multiplication des paramètres de calibration rend son identification contraignante.

Modèle Scale Unified Reactive Front (SURF)

Le modèle SURF [87], développé en 2010 par Menikoff et Shaw, s'inspire des modèles de type I&G et s'appuie sur trois concepts clés :

1. L'amorçage des points chauds dans l'explosif est dû à l'intensité du choc incident ;
2. La croissance des points chauds est pilotée par un front de combustion, dont la vitesse dépend des propriétés locales de l'écoulement ;
3. Les fronts de combustion engendrés par les points chauds finissent par coalescer. Leur prise en compte passe par l'intégration d'un facteur géométrique dans le modèle réactif.

A partir de ces considérations, la vitesse de réaction dans l'explosif est définie à partir de l'avancement des réactions :

$$\frac{d\lambda}{dt} = \frac{d}{dt} \lambda(t, P_s, P) \quad (4.9)$$

Tandis que l'avancement des réactions dans l'explosif est exprimé par :

$$\lambda(t, P_s, P) = \begin{cases} 0 & \text{si } t \leq t_s; \\ g(s(t - t_s, P_s, P)) & \text{si } t > t_s; \end{cases} \quad (4.10)$$

avec P_s la pression du choc incident et t_s son temps d'arrivée.

La fonction s correspond à la distance parcourue par le front de déflagration issu d'un point chaud isolé adimensionnée par la distance entre deux points chauds :

$$s = \frac{1}{l_{pc}} \times \underbrace{\int_{t_s}^t D_f(P(t')) dt'}_{\substack{\text{Distance parcourue par le front de} \\ \text{déflagration issu d'un point chaud}}} \quad (4.11)$$

Avec $l_{pc} = (N_{pc}(P_s))^{1/3}$ la distance entre deux points chauds et N_{pc} la densité de points chauds générés par l'onde de choc.

À partir des mesures de vitesse de déflagration réalisées par Esposito *et al.* [17], Menikoff exprime la vitesse de déflagration de l'explosif sous la forme :

$$D_f(P) = D_f(P_s)(P/P_s)^n \quad (4.12)$$

On aboutit alors à l'expression de s suivante :

$$s = \frac{1}{l_{pc}} \times \underbrace{D_f(P_s) \int_{t_s}^t \left(\frac{P(t')}{P_s}\right)^n dt'}_{\substack{\text{Distance parcourue par le front de} \\ \text{déflagration issu d'un point chaud}}} \quad (4.13)$$

La fonction g , quant à elle, correspond à une fonction géométrique afin de modéliser la coalescence des points chauds. Elle est obtenue à partir des travaux de Hill *et al.* [88] et Nichols et Tarver [89] :

$$g(s) = \begin{cases} 1 - \exp(-s^2) & \text{si 2D} \\ 1 - \exp(-s^3) & \text{si 3D} \end{cases} \quad (4.14)$$

On aboutit ainsi à la cinétique suivante :

$$\frac{d\lambda}{dt} = 2(-\ln(1 - \lambda))^{1/2}(1 - \lambda) \left(\frac{P}{P_s}\right)^n D_f(P_s) \left(N_{pc}(P_s)\right)^{1/3} \quad (4.15)$$

À partir des données de Pop-Plot, les auteurs supposent que le nombre de points chauds générés par le choc augmente rapidement avec l'intensité du choc. La relation suivante est alors supposée :

$$D_f(P_s) \left(N_{pc}(P_s) \right)^{1/3} = \exp \left(A + B \min(P_s, P_{s,\max}) / P_{ref} \right) / t_{ref} \quad (4.16)$$

où P_{ref} et t_{ref} correspondent respectivement aux unités de pression et de temps employées.

On obtient finalement l'expression :

$$\frac{d\lambda}{dt} = 2(-\ln(1-\lambda))^{1/2} (1-\lambda) \left(\frac{P}{P_s} \right)^n \exp \left(A + B \min(P_s, P_{s,\max}) / P_{ref} \right) / t_{ref} \quad (4.17)$$

où A , B , $P_{s,\max}$ et n sont les paramètres d'ajustement du modèle, déterminés à partir de mesures de vitesse matérielle à coeur.

L'une des originalités de ce modèle est la nécessité d'employer un détecteur de choc afin de déterminer la pression du choc incident P_s . Le modèle sera amélioré afin de mieux retranscrire la relation célérité-courbure d'un explosif à base de TATB [90].

4.1.3 Modèles de troisième génération

Les modèles dits de troisième génération ont été développés dans l'optique de décrire explicitement tous les phénomènes physiques mis en jeu dans la cinétique des explosifs. Cependant, cela s'accompagne d'une augmentation considérable des paramètres numériques employés dans les modèles réactifs. Ces paramètres, bien que physiques, sont parfois difficilement mesurables et se transforment alors en paramètres d'ajustement [1]. Face à ces contraintes, un retour aux modèles de deuxième génération a eu lieu et les modèles de troisième génération semblent être tombés en désuétude. Parmi ces modèles, nous pourrions tout de même citer les modèles AMORC [91] et AMOREA [43], basés sur les mécanismes d'implosion de pores ou encore le modèle SCRAM [40], basé sur l'apparition de points chauds par friction le long des fissures intragranulaires. Parallèlement, avec l'augmentation des puissances de calcul, une nouvelle approche de la TCD émerge : l'approche mésoscopique. A travers cette nouvelle approche, l'explosif n'est plus représenté comme un matériau homogène.

4.2 Vers des modèles de quatrième génération : l'approche mésoscopique

Comme nous avons pu le voir dans la section précédente, les modèles macroscopiques sont basés soit sur une description empirique de la TCD, soit sur des hypothèses réalisées sur les mécanismes d'apparition et de croissance des points chauds.

Avec l'approche mésoscopique, l'explosif n'est plus représenté comme un matériau homogène avec une cinétique retranscrivant la formation et la croissance des points chauds *via* des paramètres numériques ajustables. Désormais, l'objectif n'est plus de modéliser la TCD mais de la calculer explicitement à partir de la microstructure des explosifs. Avec des modèles physiques pertinents, l'approche mésoscopique devrait permettre de mieux comprendre les phénomènes d'apparition de points chauds ainsi que leur croissance [11]. Elle constitue également un moyen d'alimenter les modèles macroscopiques de transition choc-détonation qui pourraient alors se baser sur les résultats de simulations mésoscopiques pour établir leur cinétique globale plutôt que sur des résultats expérimentaux. Un schéma illustrant la différence entre l'approche macroscopique et l'approche mésoscopique est présenté en figure 4.2.

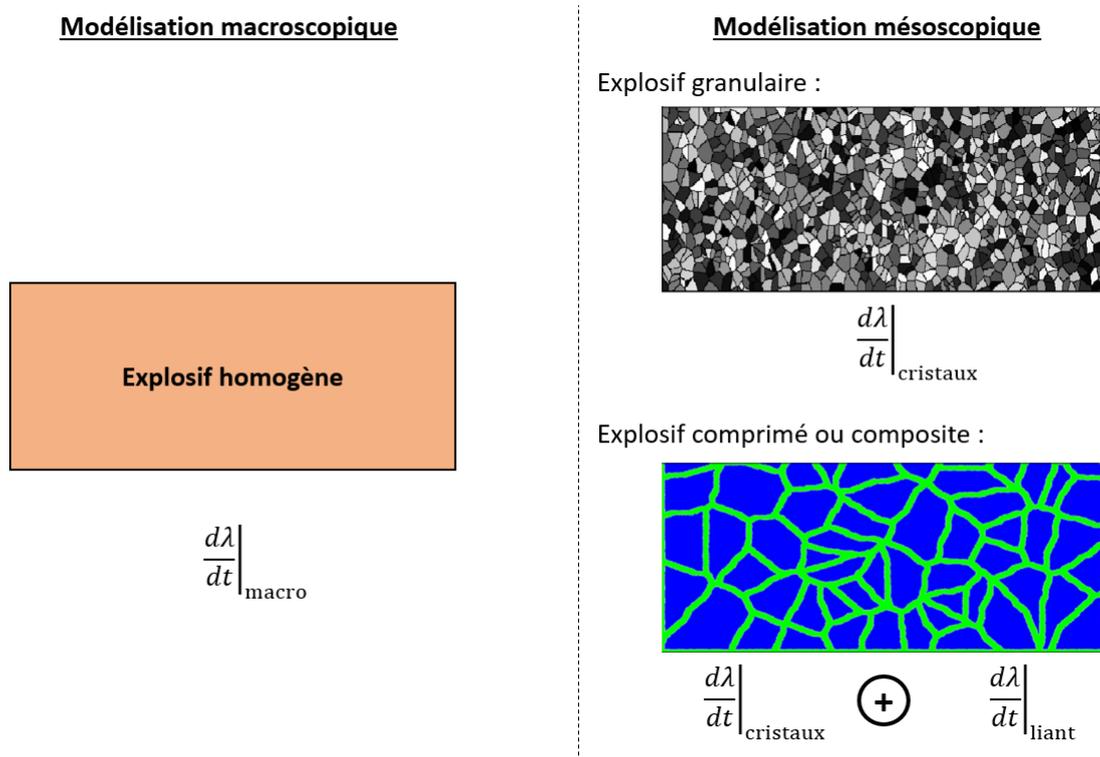


FIGURE 4.2 – Schéma explicatif de la distinction entre approche macroscopique et approche mésoscopique.

Cette approche présente néanmoins un certain nombre de difficultés. Tout d'abord, elle nécessite de disposer de modèles de matériaux pour toutes les phases composant l'explosif, aussi bien sous leur forme inerte que réagie. Bien que des efforts émergent dans la détermination de ces modèles pour les cristaux énergétiques les plus répandus, les liants sont encore globalement mal

caractérisés [11]. Les vitesses de réaction sous choc et en régime de détonation sont également mal connues, non seulement pour les cristaux énergétiques, mais encore plus pour les liants [11].

Une difficulté supplémentaire se trouve dans la modélisation de la microstructure de l'explosif. En effet, afin de restituer correctement la TCD d'un explosif, il faut que les microstructures utilisées dans les simulations aient des propriétés morphologiques similaires à celles de l'explosif réel [11]. Les volumes étudiés dans les simulations doivent également être représentatifs^a de la microstructure considérée. La microstructure des explosifs étant stochastique par nature, l'étude de la TCD à l'échelle mésoscopique doit s'accompagner d'une analyse statistique des résultats des simulations [92]. Deux choix sont alors possibles :

- les microstructures sont obtenues expérimentalement par microscopie ou microtomographie. Dans ce cas, elles possèdent les mêmes propriétés morphologiques que l'explosif réel, mais l'étude du caractère stochastique de la TCD est restreinte aux données expérimentales disponibles. De plus, elles présentent des géométries complexes, ce qui peut compliquer l'analyse des simulations numériques [27] ;
- les microstructures sont générées artificiellement. Cela permet un meilleur contrôle de leurs propriétés morphologiques. Il est alors possible de décorréler certains paramètres microstructuraux afin d'étudier leur influence sur la formation des points chauds et sur la TCD. Avec cette approche, un grand nombre d'échantillons peut être généré aléatoirement afin de prendre en compte l'aspect stochastique de la microstructure. Cependant, les microstructures artificielles ne présentent généralement pas les mêmes propriétés morphologiques que l'explosif réel.

Dans la littérature, la plupart des simulations mésoscopiques de Transition Choc-Détonation utilisent des microstructures générées artificiellement [93-110]. Les simulations réalisées avec des microstructures déterminées expérimentalement sont plus rares [27, 30, 97].

Parmi les travaux réalisés à l'échelle mésoscopique, on peut distinguer deux champs d'étude complémentaires :

1. les études portant sur la formation des points chauds. Elles ont pour objectif de déterminer quels sont les mécanismes les plus susceptibles d'engendrer des réactions chimiques dans l'explosif. Elles sont souvent appliquées à la détermination de seuils d'amorçage. Il s'agit généralement d'études réalisées avec une modélisation inerte de l'explosif. Dans ce cas, on ne dispose pas d'information directe sur la potentielle croissance des points chauds et leur contribution à la TCD ;
2. les études portant sur la TCD à l'échelle mésoscopique. Par définition, ce sont des simulations modélisant l'explosif comme étant réactif. Généralement, ces études se focalisent sur la détermination du Pop-Plot.

a. Un volume est dit représentative si ses dimensions sont grandes par rapport aux tailles caractéristiques de la microstructure [27].

Dans cet état de l'art, nous commencerons par présenter les prémices de la modélisation mésoscopique. Nous nous concentrerons ensuite sur les travaux consacrés aux mécanismes de formation des points chauds. En dernier point, nous discuterons des études portant sur la TCD, qui est l'objet de cette thèse.

4.2.1 Les prémices

À la fin des années 1990, M.R. Baer [94, 111-114], des Sandia National Laboratories, réalise une série d'études qui compte parmi les premières simulations numériques à l'échelle mésoscopique de la TCD. Dans cette section, nous nous focaliserons principalement sur l'étude réalisée par Baer [94] en 2002 puisqu'elle regroupe les résultats de ses publications plus anciennes [111-114].

Dans ces travaux, des simulations inertes sont réalisées sur une microstructure d'une poudre de HMX et sur une microstructure constituée de HMX et de polyuréthane. Les cristaux de HMX sont représentés par des polyèdres à l'orientation aléatoire (figure 4.3.d). Pour la microstructure de HMX/polyuréthane, des porosités sont introduites à hauteur de 5%. À partir de ces simulations, on observe que les explosifs hétérogènes soumis à un choc subissent de fortes fluctuations de pression et des zones de concentration d'énergie à l'échelle de la microstructure. Ces concentrations d'énergie sont dues aux interactions de l'onde de choc avec la surface des cristaux [94]. La présence de porosités dans le liant engendre des micro-jets lors du passage de l'onde de choc. Ces derniers pénètrent les cristaux de HMX adjacents et induisent une élévation de la température.

Des microstructures d'explosif granulaire constituées d'un arrangement ordonné de particules sphériques et d'un arrangement de particules cubiques à l'orientation aléatoire (figure 4.3.a et 4.3.b) est ensuite étudié afin de déterminer l'influence de la forme des cristaux sur la propagation du choc. Les fluctuations spatiales de pression observées sont importantes : pour la microstructure cubique, l'intensité du choc est de 32.5 GPa dans la première rangée de grains, tandis qu'elle est d'environ 5 GPa pour la dernière rangée de grains. L'amplitude de ces fluctuations est plus marquée pour la microstructure sphérique. En effet, l'orientation aléatoire des particules cubiques atténue l'amplitude des fluctuations de pression. Ces résultats, bien qu'obtenus pour des poudres, devraient être extensibles aux explosifs hétérogènes. Néanmoins, les fluctuations de pression devraient être moins marquées du fait de la différence d'impédance acoustique moins importante entre le HMX et le liant qu'entre le HMX et l'air.

Une simulation réactive est également réalisée pour une microstructure d'explosif granulaire (figure 4.3.e) avec une cinétique *History Variable Reactive Burn* (HVRB) [115], dépendante de la pression. Les résultats obtenus sont principalement qualitatifs et démontrent la complexité des ondes de choc et de détonation se propageant dans les explosifs solides hétérogènes [94].

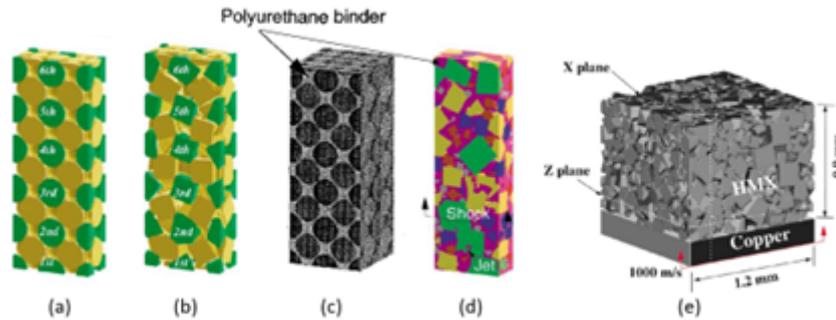


FIGURE 4.3 – Illustration des microstructures sphérique (a) et cubique (b) utilisées en compaction de poudre, et des microstructures sphérique (c), polyédrique inerte (d), et polyédrique réactive (e) utilisées en contexte de TCD par M.R. Baer [94]

Ces simulations ont mis en évidence la forte hétérogénéité que présentent les ondes de choc et les ondes de détonation à l'échelle de la microstructure. La modélisation des chocs et des détonations à l'échelle mésoscopique se révèle bien plus complexe que l'approche macroscopique usuelle. Elle apparaît alors comme une nouvelle approche possible pour améliorer la compréhension de l'amorçage des explosifs hétérogènes.

4.2.2 Étude des seuils d'amorçage

Bien que les travaux de Baer [94, 111-114] à la fin des années 1990 aient mis en lumière la richesse de l'approche mésoscopique, il faudra attendre le début des années 2010 et l'augmentation de la puissance de calcul pour que celle-ci émerge réellement. Les études se focalisent alors sur l'amorçage des réactions chimiques dans les explosifs. Parmi ces études, un certain nombre d'entre elles proviennent du laboratoire de Georgia Tech qui devient le contributeur principal de l'approche mésoscopique appliquée aux explosifs.

Travaux réalisés par le laboratoire de Georgia Institute of Technology

Contrairement aux travaux de Baer, les études réalisées par le laboratoire de Georgia Tech se focalisent principalement sur les seuils d'amorçage et la prise en compte du caractère stochastique apporté par la microstructure [116].

Afin de traiter ces problématiques liées à l'amorçage, les simulations numériques réalisées par l'équipe de Georgia Tech utilisent une méthode d'éléments finis cohésifs (CFEM) implémentée dans le code de simulation Cohesive Dynamics for eXplosives (CODEX) [116] développé en interne [104]. L'intégration de CFEM dans CODEX permet le traitement des larges déformations, de l'endommagement par fissuration, de l'échauffement par friction et du couplage thermomécanique [97]. Le solveur employé est lagrangien. La majeure partie des études réalisées avec CODEX modélise l'explosif comme un matériau inerte [97, 99, 101-103, 105]. Des algorithmes de détection des points chauds ont été développés conjointement au code de calcul.

Le code de calcul CODEX étant développé à Georgia Tech depuis plus de 15 ans [104], il a connu un certain nombre d'évolutions en terme de mécanismes physiques traités et de critères d'amorçage. Nous présenterons dans un premier temps les différentes étapes de développement du code CODEX et les critères d'amorçage formulés au cours de ces développements. Ensuite, nous présenterons les résultats des différents travaux réalisés au sein du laboratoire.

Développement de CODEX/CFEM

La méthode des éléments finis cohésifs CFEM intégrée dans CODEX a été initialement développée dans le cadre des travaux de Barua *et al.* [97] en 2011 afin que les simulations puissent tenir compte de la fissuration des matériaux ainsi que des interactions (contact et friction) qui résultent de cette fissuration. Dans ces premiers travaux, les réactions chimiques ne sont pas prises en compte et les simulations sont bidimensionnelles. L'endommagement est intégré par le biais d'une variable d'état dépendant de l'écart entre deux interfaces. Elle dépend de valeurs seuils inhérentes au type d'interface considérée. Ainsi, si l'on se trouve dans le grain, le liant ou à l'interface entre le grain et le liant, la valeur seuil employée sera différente. La décohésion grain/liant est retranscrite dans le code de calcul par ce critère d'endommagement. La friction, quant à elle, est retranscrite à travers un échange de chaleur entre deux surfaces et dépend de la conductivité thermique, de la masse volumique et de la chaleur spécifique des matériaux en contact. Bien qu'initialement les réactions chimiques ne soient pas prises en compte dans le code de calcul, elles ont été intégrées par la suite [106]. De même, la possibilité de réaliser des calculs tridimensionnels semble avoir été intégrée relativement récemment dans le code de calcul [107].

Critère de détection des points chauds

Dans la plupart des simulations réalisées avec le *framework* CFEM de CODEX, les réactions chimiques ne sont pas modélisées. Il est donc nécessaire de disposer d'un critère de détection pour identifier les points chauds et quantifier leur impact sur l'amorçage de l'explosif. Ainsi, plusieurs critères de détection ont vu le jour au cours du développement de CFEM :

- le critère de la loupe ;
- le critère de la *Radial Distribution Function* (RDF) ;
- le critère de température seuil.

Un critère dit de « criticité » a été également défini afin d'identifier les points chauds critiques, *i.e.* qui ne seront pas éteints par les effets de la conduction thermique. Ces critères sont détaillés en annexe A.

Avec l'intégration des réactions chimiques au *framework* CFEM de CODEX [106], il n'est plus nécessaire de disposer de critères pour détecter les points chauds : ceux-ci correspondent directement aux sites d'activation des réactions chimiques. Cependant, selon les auteurs, l'utilisation d'un solveur lagrangien ne permet pas de traiter les phénomènes physiques se déroulant après l'amorçage. Ainsi, les simulations sont exploitées jusqu'à ce que les premières réactions chimiques apparaissent [107].

Critère d'amorçage et de probabilité d'amorçage

Les études menées au sein du laboratoire de Georgia Tech s'insèrent dans la prédiction de l'amorçage des explosifs et visent à quantifier les effets de la microstructure sur cet amorçage [116]. Pour les simulations réalisées en inerte, un critère d'amorçage a été développé, destiné à déterminer si l'explosif s'amorce. Ce critère est ensuite utilisé afin de quantifier l'influence de la microstructure des explosifs sur les seuils d'amorçage.

En 2013, Barua *et al.* [99] formulent ainsi un critère d'amorçage basé sur la densité de points chauds critiques dans la microstructure. Pour cela, ils définissent une grandeur t_c , appelée temps à la criticité, correspondant au temps nécessaire pour que la densité de points chauds critiques dans la microstructure soit supérieure ou égale à 0.22 mm^{-2} , soit deux points chauds dans un carré de 3 mm de côté [100]. Cette valeur a été retenue après avoir constaté, sur plusieurs simulations, que le passage d'une densité de points chauds critiques de 0.11 mm^{-2} à 0.44 mm^{-2} ne générerait qu'une variation maximale de 6% du temps à la criticité t_c [99]. Cependant, cette observation n'a été réalisée que pour des vitesses d'impact comprises entre 50 m s^{-1} et 250 m s^{-1} et une seule microstructure [99]. Il est donc possible que des variations plus importantes de t_c soient observées hors de cette plage de validité. Ce critère permet tout de même une étude comparative entre différentes microstructures et différentes vitesses d'impact. Par la suite, ce critère sera systématiquement employé lors de l'utilisation de CODEX dans le cadre de l'amorçage par impact de matériaux énergétiques traités en inerte [99, 101-103, 105, 110].

Ce critère d'amorçage sert ensuite à développer des probabilités d'amorçage pour des microstructures générées artificiellement et soumises à un certain nombre de sollicitations. Pour chaque sollicitation, l'amorçage est observé sur certaines microstructures. Le nombre de microstructures amorcées permet alors de déterminer une probabilité d'amorçage. Il est ainsi possible de réaliser des cartes de probabilité sur des courbes Flux de puissance – Flux d'énergie [102, 103, 105, 106, 110], ou Pression – Durée du choc, [103, 110]. Une illustration de ces cartes est disponible en figure 4.4.

Résultats des études réalisées au sein de Georgia Tech

À l'instar du développement des outils intégrés dans CODEX (voir annexe A), les travaux réalisés au sein de Georgia Tech sur l'amorçage des explosifs à l'échelle mésoscopique sont présentés chronologiquement afin de souligner leur évolution.

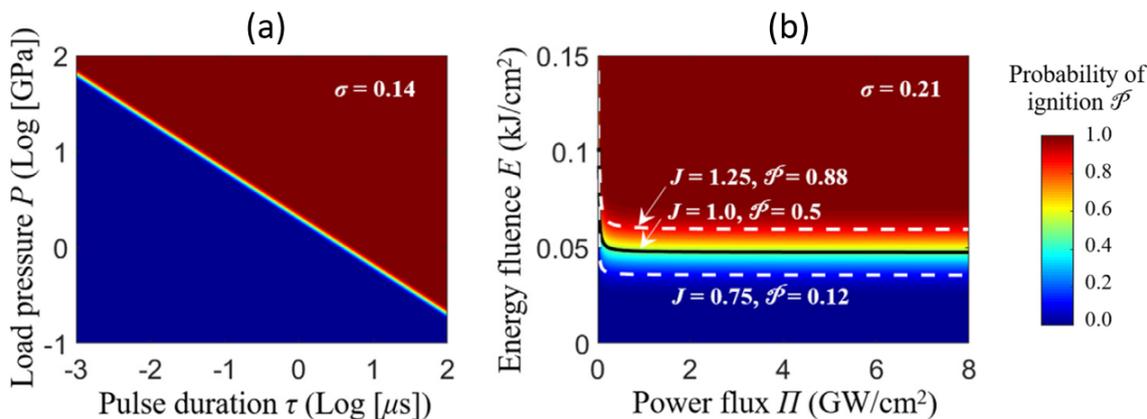


FIGURE 4.4 – Illustration des cartes de probabilité superposées sur des courbes Flux de puissance - Flux d'énergie (a) et Pression - Durée du choc (b) issues des travaux de Kim *et al.* [103]

En 2011, Barua réalise des impacts soutenus à faible vitesse sur des microstructures constituées de grains de HMX dans un liant en Estane [97]. L'impact est modélisé par une rampe de vitesse appliquée comme condition limite de la simulation. Les microstructures utilisées proviennent d'une microtomographie d'un explosif factice, constitué de 66% de cristaux de sucre dans un liant en PBHT [116, 117]. Une homothétie est ensuite appliquée aux grains afin de faire varier la fraction volumique de grains. Dans la suite de cette section, nous emploierons le terme de microstructure réaliste pour se référer à ces microstructures. Des microstructures artificielles avec des distributions monomodales et bimodales de grains sphériques sont également employées ainsi que des microstructures avec des grains de forme carrée et une distribution monomodale (figure 4.5).

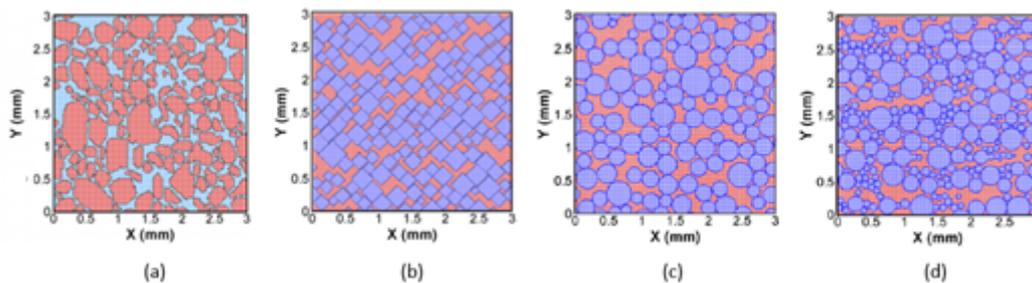


FIGURE 4.5 – Illustration des microstructures réalistes (a), à grains carrés (b), monomodale à grains sphériques (c) et bimodale à grains sphériques (d) pour une fraction volumique de grain de 0.69 utilisée par Barua *et al.* [97]. La microstructure (a) est ré-utilisée dans [97-99] et les microstructures (c) et (d) sont ré-utilisées dans [99].

La phénoménologie observée pour la microstructure réaliste est la suivante.

Aux premiers instants suivant l'impact, la dissipation d'énergie résulte principalement de la déformation du liant viscoélastique et s'accompagne d'une élévation de la température. Ces régions d'échauffement dans le liant coalescent ensuite pour former des bandes de cisaillement. Ce phénomène est observé pour toutes les microstructures. Au delà d'un certain seuil de déformation, des interactions entre grains apparaissent. Les contacts entre grains s'accompagnent d'une forte concentration de contraintes, d'une décohésion grain/liant et de fissuration. De l'énergie est

alors dissipée sous forme de chaleur par friction. Les fissures et les zones de décohésion génèrent également de nouvelles surfaces libres qui pourront entrer en contact et générer davantage de chaleur à mesure de la déformation de l'explosif.

Les simulations réalisées avec les microstructures réalistes montrent qu'une fraction volumique de grain élevée induit des déformations plus importantes dans le liant. Les interactions entre les grains et la décohésion grain/liant apparaissent alors plus tôt dans l'explosif. Cela favorise la fissuration et la friction et engendre un échauffement plus important de l'explosif. L'influence de la morphologie des grains (*i.e.* cubique, sphérique ou réaliste) est également étudiée ainsi que l'effet de la bimodalité de la distribution pour une microstructure sphérique. Pour cela, les simulations sont réalisées à fraction volumique fixée. Pour de faibles déformations, les microstructures présentent le même comportement : aux premiers instants, c'est donc la fraction volumique initiale qui détermine la réponse de l'explosif à l'impact. Cependant, pour des déformations plus importantes, les résultats obtenus diffèrent entre les microstructures. L'énergie dissipée par friction est plus importante pour les microstructures à grains sphériques. De plus, la décohésion grain/liant est favorisée lorsque la surface des grains est plane. Pour les microstructures bimodales, la cohabitation des grains de petit diamètre et de gros diamètre rend plus difficile le glissement des grains, ce qui a pour conséquence de générer des contraintes plus importantes. Pour toutes les microstructures, la décohésion entre les grains et le liant représente le principal mécanisme de dissipation d'énergie. Cependant, bien que ce résultat fournisse des informations sur la réponse de la microstructure d'un explosif à un impact, il ne tient pas compte de la localisation de l'élévation de chaleur. Par exemple, la déformation viscoélastique du liant peut apparaître comme un mécanisme de dissipation d'énergie important sans générer de température très intense dans la microstructure, car il est réparti sur des régions assez grandes.

En 2012, Barua *et al.* [98] emploie de nouveau les microstructures issues des microtomographies de Siviour *et al.* [117]. Comme dans les travaux précédents, une homothétie est réalisée pour obtenir différentes fractions volumiques de grains. Des microstructures artificielles sont également générées par tessellation de Voronoï, avec des diamètres moyens et des écart-types similaires [98]. Des impacts à faible vitesse sont ensuite simulés pour plusieurs vitesses d'impact et différents confinements. Les résultats montrent que la décohésion grain/liant est plus importante avec des vitesses d'impact faibles qu'avec des vitesses d'impact élevées. En effet, de par son caractère viscoplastique, le liant est moins rigide et plus sensible au cisaillement à faible vitesse d'impact. Cela permet aux déformations viscoélastiques de se propager plus facilement dans la microstructure. Pour des vitesses élevées, le liant est plus rigide, ce qui réduit le nombre de bandes de cisaillement. Des contraintes plus importantes sont alors observées dans les grains et la fissuration apparaît plus tôt. Les zones d'échauffement intense sont concentrées à proximité de la surface d'impact. Pour toutes les configurations, la formation des points chauds est principalement située dans le liant et aux interfaces grain/liant. On observe alors qu'une fraction volumique importante de grains s'accompagne d'une énergie dissipée par fissuration plus élevée. Cela s'explique par le fait que la distance entre deux grains est réduite pour les taux de chargement élevés. Par conséquent, les interactions entre les grains sont plus importantes. Ces observations sont qualitativement similaires à celles obtenues pour une augmentation du confinement. En effet, la dissipation de

l'énergie par friction et par déformation viscoélastique est favorisée pour un confinement important. Cela est notamment dû au fait que lors de la fissuration des grains, les deux surfaces créées vont s'éloigner l'une de l'autre lorsque le confinement est faible. La friction générée s'en trouve diminuée.

En 2013, la microstructure issue de la microtomographie d'explosif factice [97] est employée une nouvelle fois pour modéliser un PBX. Des microstructures artificielles sont également générées afin de modéliser des poudres comprimées. Des distributions monomodales et bimodales servent de base pour générer ces microstructures [99]. Deux configurations sont étudiées : une simulation de dimension $3\text{ mm} \times 3\text{ mm}$ et une simulation de dimension $15\text{ mm} \times 3\text{ mm}$. Ces deux configurations sont réalisées afin de juger de l'influence de la réflexion des ondes de compression en face arrière, observée pour les échantillons de $3\text{ mm} \times 3\text{ mm}$, sur l'apparition des points chauds. Une illustration de ces configurations est disponible en figure 4.6.

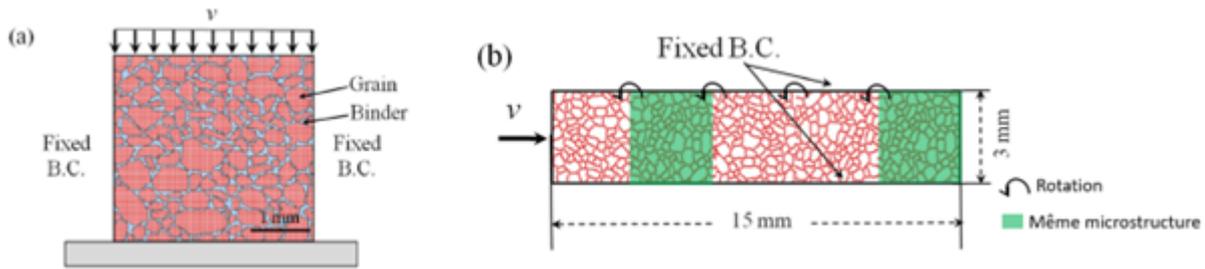


FIGURE 4.6 – Illustration des deux configurations employées par Barua *et al.* [99]. Les flèches et la couleur verte ont été ajoutées afin de souligner la méthode de génération de la microstructure.

Les résultats des simulations diffèrent considérablement selon la configuration étudiée. Ainsi, pour la configuration de dimension $3\text{ mm} \times 3\text{ mm}$, la réflexion des ondes de compression sur la face arrière tend à homogénéiser la température dans l'échantillon, tandis que pour la configuration de dimension $15\text{ mm} \times 3\text{ mm}$, la température décroît au fur et à mesure que l'on s'éloigne de la face impactée. Pour la configuration sans réflexion des ondes de compression, *i.e.* de dimension $15\text{ mm} \times 3\text{ mm}$, l'élévation de température et les mécanismes d'endommagement ont lieu bien après le passage de l'onde de compression. À mesure que l'on s'éloigne de la face impactée, la température dans l'explosif diminue. Ainsi, il serait possible que l'amorçage provienne de l'élévation de température résultant des mécanismes d'endommagement ayant lieu proche de la face de l'impacteur. Cette élévation de température amorcerait donc des réactions chimiques dans les grains énergétiques à cet endroit. Dans la littérature, d'autres auteurs ont également observé une élévation de température proche de la face de l'impacteur lors de simulations mésoscopiques [27, 93].

En 2014, Kim génère des microstructures bimodales [101] (figure 4.7). La méthode de génération employée consiste à générer deux microstructures monomodales par tessellation de Voronoï : une avec un diamètre moyen élevé, et une avec un faible diamètre moyen. Ces deux microstructures permettent de créer une librairie de grains. Une microstructure bimodale est ensuite générée grâce à un algorithme de placement aléatoire des grains à partir de la librairie créée. Les microstructures bimodales générées avec cet algorithme sont de dimension $15\text{ mm} \times 3\text{ mm}$. Cependant,

seule une zone de dimension $3\text{ mm} \times 3\text{ mm}$ à proximité de l'impacteur est analysée. L'utilisation d'une microstructure plus grande que la zone d'étude est réalisée afin d'éviter la réflexion des ondes en face arrière de l'échantillon. Dans les travaux de Barua *et al.* [99], les températures intenses étaient principalement localisées proches de l'impacteur et les points chauds critiques avaient une probabilité plus élevée de se trouver à cet endroit. Le choix d'une zone d'étude proche de l'impacteur devrait donc permettre de détecter les points chauds les plus intenses. Les simulations sont analysées selon leur temps à la criticité, défini en 4.2.2. L'étude se focalise sur les effets de la force de cohésion entre les grains et le liant.

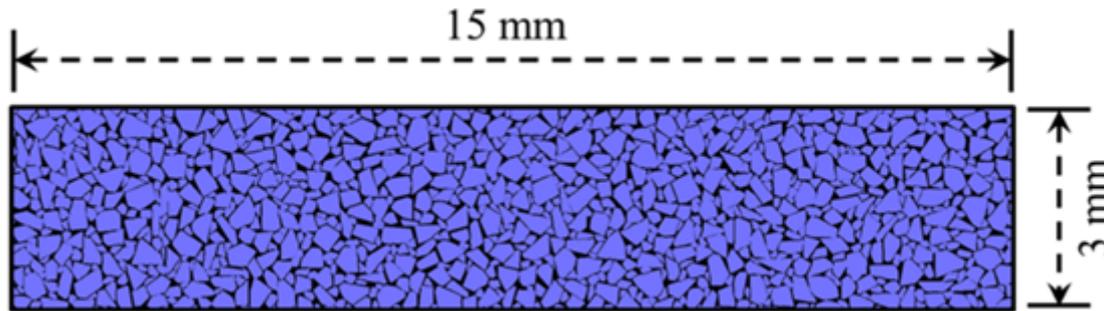


FIGURE 4.7 – Illustration d'une microstructure employée par Kim *et al.* [101]. Des microstructures similaires sont ré-utilisées par Wei *et al.* [106].

Trois configurations sont étudiées :

1. la force de cohésion est considérée comme uniforme dans la microstructure. Des simulations sont réalisées avec différentes valeurs de force de cohésion pour chaque microstructure (groupe A) ;
2. la force de cohésion est considérée comme variable spatialement selon une gaussienne centrée. Plusieurs simulations sont réalisées pour chaque microstructure (groupe B) ;
3. trois microstructures sont sélectionnées parmi celles utilisées dans la série des simulations avec une force de cohésion uniforme (groupe A). Ces trois microstructures sont prises comme référence et correspondent aux microstructures ayant le temps à la criticité minimum, médian, et maximum (que l'on notera respectivement microstructures a, b et c). Plusieurs simulations sont réalisées pour chacune de ces microstructures avec une force de cohésion variant spatialement selon une gaussienne centrée (groupe C).

Les résultats des simulations du groupe A indiquent que l'augmentation de la force de cohésion s'accompagne d'une augmentation du temps à la criticité médian ainsi que de son écart-type. Les résultats des simulations du groupe B montrent qu'en moyenne les échantillons avec une force de cohésion variable présentent le même nombre et la même fraction surfacique de points chauds que les échantillons avec une force de cohésion uniforme. Cependant, aucun détail n'est disponible concernant les valeurs des temps à la criticité. Il est donc difficile de relier cette information aux deux autres groupes. Les résultats des simulations du groupe C suggèrent que la sensibilité des trois microstructures de référence est conservée, *i.e.* le temps à la criticité médian de la microstructure (c) est toujours supérieur à celui de la microstructure (b), lui-même supérieur à celui de la microstructure (a). Cependant, les temps à la criticité médians ne sont pas centrés sur les temps à la criticité obtenus pour une force de cohésion uniforme de 35 MPa, malgré le

fait que la force de cohésion variable soit une gaussienne centrée en 35 MPa. En se basant sur le critère de temps à la criticité, la sensibilité des explosifs est donc principalement déterminée par la microstructure. Toutefois, la dispersion de sensibilité est plus importante pour les forces de cohésion élevées. Certaines microstructures sont plus sensibles aux variations de la force de cohésion, bien qu'elles proviennent du même algorithme de génération.

En 2016, Kim emploie à nouveau le critère du temps à la criticité pour déterminer la probabilité d'amorçage d'explosifs granulaires avec des granulométries différentes [102]. Pour chaque explosif, plusieurs microstructures monomodales sont générées par tessellation de Voronoï (figure 4.8). L'anisotropie et la présence de pores dans les grains est implicitement prise en compte en faisant varier le module d'Young et le module d'élasticité isostatique associés aux grains. Des simulations d'impact de plaques en choc non soutenu sont réalisées pour différentes vitesses d'impact et durée de choc. La probabilité d'amorçage est alors représentée dans le diagramme Flux de puissance – Flux d'énergie. Les points correspondant à l'amorçage (au sens du temps à la criticité) de 50% des échantillons sont employés pour réaliser une régression de la courbe associée au critère de James [118], qui caractérise l'amorçage d'un explosif à partir du flux d'énergie et du flux de puissance. Ces simulations sont comparées avec les résultats expérimentaux de Welle *et al.* [119] et une bonne correspondance est obtenue.

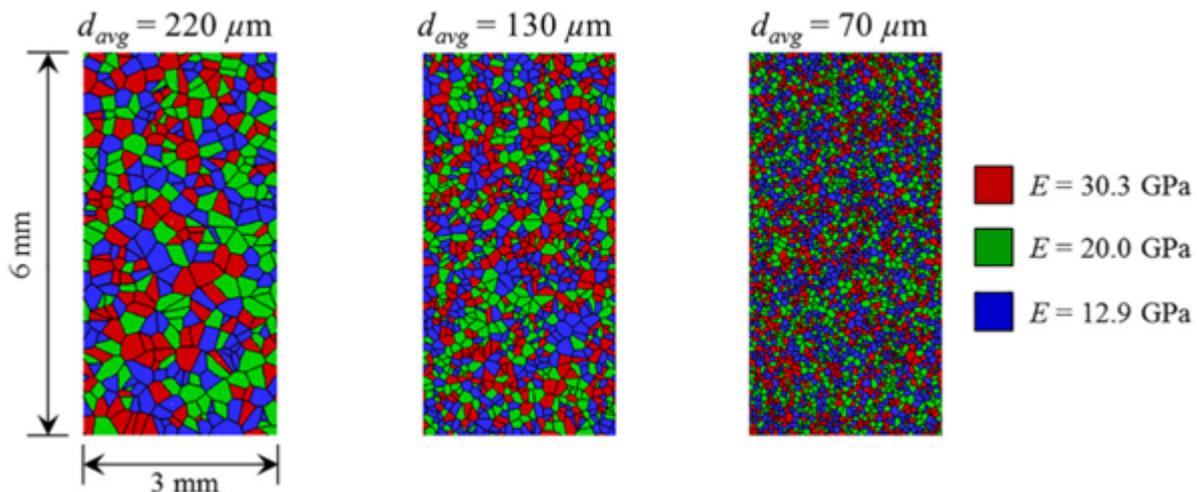


FIGURE 4.8 – Illustration des microstructures employées par Kim *et al.* [102], pour différents diamètres de grains, avec un module de Young variable

L'étude des seuils d'amorçage pour des chocs non soutenus se poursuit avec les travaux de Kim *et al.* [103] en 2018. Les microstructures sont monomodales et générées à partir du répertoire de grains provenant des tessellations de Voronoï (figure 4.9). Elles sont composées à 81% de HMX et 19% de liant et visent à reproduire une microstructure de PBX-9404. Les simulations d'impact de plaque sont réalisées pour plusieurs vitesses d'impact et plusieurs durées de choc. Pour chaque impact, plusieurs microstructures sont utilisées afin d'obtenir une variation des seuils d'amorçage. Les résultats des simulations indiquent que le nombre de points chauds est plus important pour des vitesses d'impact élevées. Dans toutes les configurations étudiées, les points chauds sont principalement localisés à proximité de l'impacteur. Cela provient probablement du fait que les chocs sont non soutenus et donc que le niveau de pression s'atténue à mesure que le choc se

propage. Les auteurs notent une corrélation entre l'énergie dissipée et la formation des points chauds. Une étude paramétrique est également réalisée afin de déterminer l'impact des propriétés du liant sur la dissipation de l'énergie et les seuils d'amorçage. D'après les auteurs, ces derniers sont principalement influencés par la masse volumique et la chaleur spécifique. Les résultats indiquent qu'un liant avec une masse volumique faible tend à augmenter l'énergie dissipée par friction. Cette augmentation d'énergie est due au fait qu'un liant avec une faible masse volumique tend à engendrer davantage de fissuration dans les cristaux et aux interfaces entre le liant et les cristaux. La chaleur spécifique du liant, quant à elle, n'influence que très peu la dissipation d'énergie mais joue un rôle dans l'élévation de température.

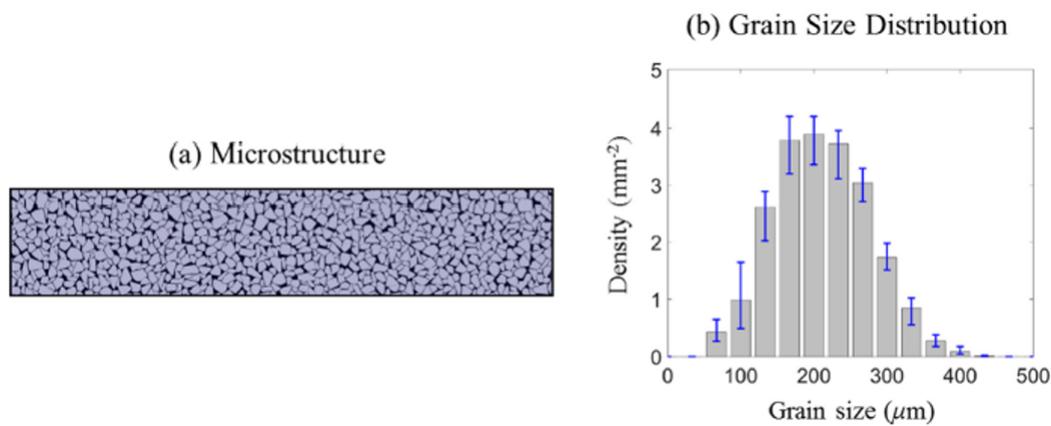


FIGURE 4.9 – (a) Illustration d'une microstructure générée par Kim *et al.* [103]. (b) Granulométrie moyenne des microstructures générées par Kim *et al.* [103].

Ces travaux seront repris par Wei *et al.* [105] en intégrant soit des fissures, soit de la décohésion dans les microstructures avant les simulations d'impact. Trois niveaux de décohésion sont étudiés, pour lesquels 0%, 50% et 100% du contour des grains ne sont plus en cohésion avec le liant (voir figure 4.10.a-c). Dans les microstructures générées avec de la décohésion, chaque grain possède au maximum un site de décohésion. De même, trois niveaux de fissuration sont considérés : 0%, 10% et 20% (voir figure 4.10.d-f). Ce pourcentage est exprimé à partir du rapport $L_{fissure}/L_{grain}$, où $L_{fissure}$ correspond à la somme de la longueur des fissures de chaque grain, et L_{grain} à la somme du périmètre de chaque grain. Lorsqu'une fissure est introduite dans un grain, celle-ci le traverse entièrement. Dans les microstructures générées avec des fissures, chaque grain possède au maximum une fissure. À l'instar des travaux de Kim *et al.* [103], les simulations d'impact de plaque sont réalisées pour plusieurs vitesses d'impact et plusieurs durées de choc. Dans toutes les configurations considérées, l'énergie est principalement dissipée dans un champ proche de l'impacteur. Que ce soit pour la décohésion ou la fissuration, l'augmentation du nombre de défauts induit une augmentation de l'énergie dissipée par friction. Pour des vitesses d'impact élevées, l'influence du nombre de défauts sur l'énergie dissipée est moins marquée que pour des vitesses d'impact faibles. La présence de défauts dans la microstructure va donc principalement jouer un rôle à faible vitesse d'impact. Des observations similaires sont réalisées en terme de distribution de points chauds. Ainsi, les points chauds sont plus proches de l'impacteur lorsque la vitesse d'impact est élevée.

L'augmentation du nombre de défauts induit une augmentation du nombre de points chauds. Cette tendance est plus marquée pour des vitesses d'impact faibles que pour des vitesses d'impact élevées.

Une étude de la proximité des points chauds aux défauts introduits est également menée. Pour les vitesses d'impact faibles, la majorité des points chauds apparaissent à proximité des défauts introduits. Lorsque la vitesse d'impact augmente, la proportion de points chauds à proximité des défauts tend à diminuer. Les défauts ne semblent donc jouer qu'un rôle secondaire dans l'apparition des points chauds à vitesse d'impact élevée.

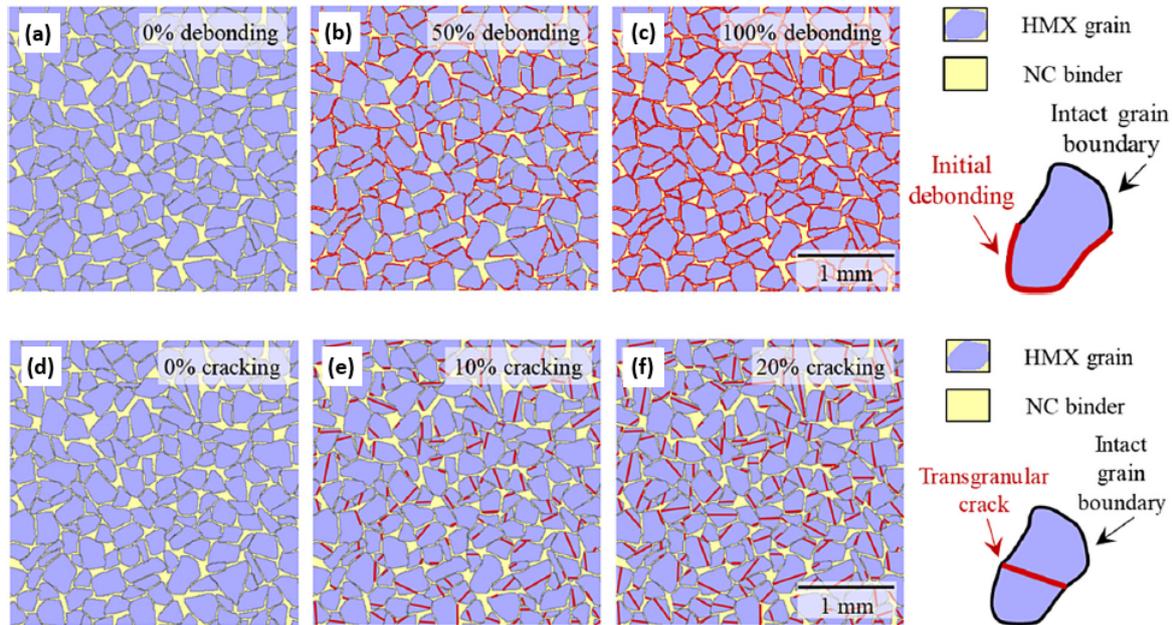


FIGURE 4.10 – Illustration des microstructures employées par Wei *et al.* [105]. Les microstructures sans défauts sont représentées en (a) et (d). Les microstructures avec de la décohésion entre les grains et le liant sont représentées en (b) et (c). Les microstructures avec des grains fissurés sont représentées en (e) et (f).

En 2021, Wei *et al.* [106] utilisent des microstructures monomodales générées à partir de la librairie de grains issus d'une tessellation de Voronoï. Elles sont soumises à des impacts non soutenus en faisant varier la vitesse de l'impacteur et la durée du choc généré. Les simulations sont bidimensionnelles et les réactions chimiques sont modélisées. Les résultats des simulations montrent que pour une même microstructure et une même vitesse d'impact, il existe une valeur seuil de la durée du choc en dessous de laquelle le HMX ne réagit pas et au-dessus de laquelle on peut observer des réactions chimiques (figure 4.11). Le tracé de ces valeurs seuils, en termes de flux de puissance et de flux d'énergie, est ensuite réalisé et une régression du critère de James est effectuée. L'utilisation du critère de détection de la RDF et de criticité (voir annexe A) est également employé pour déterminer un courbe de Flux puissance - Flux d'énergie. Une bonne correspondance est alors obtenue entre la régression réalisée précédemment et l'emploi du critère de la RDF. L'erreur moyenne entre les deux courbes de Flux puissance - Flux d'énergie est de 15.8%. Cela suggère que les critères de détection employés dans les simulations réalisées en inerte sont pertinents.

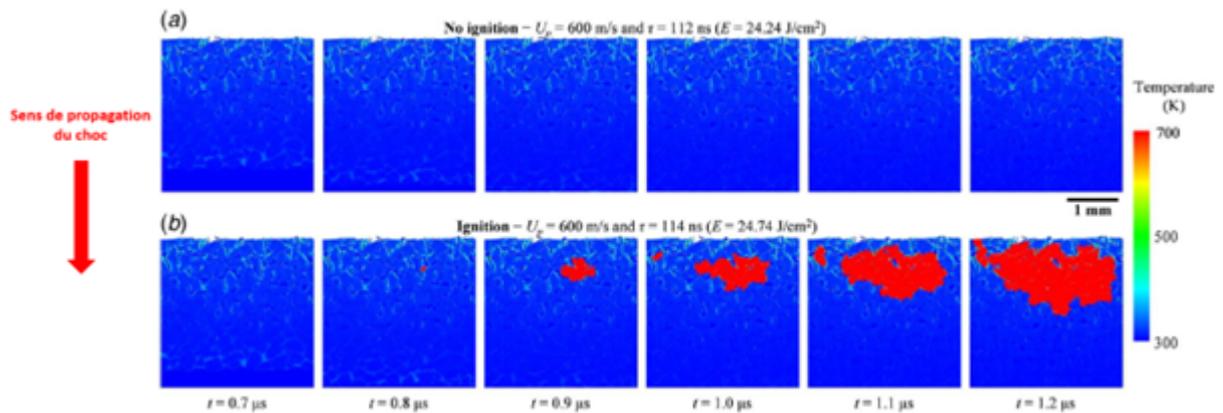


FIGURE 4.11 – Illustration du champ de température obtenu par Wei [106] pour l’amorçage d’une microstructure avec une vitesse d’impact de 600 m s^{-1} et une durée de choc de (a) 112 ns et de (b) 114 ns.

Étude réalisées parallèlement aux travaux de Georgia Tech

Parallèlement aux travaux de Georgia Tech, d’autres études sur l’amorçage des explosifs ont également vu le jour.

Ainsi, en 2011, Handley réalise des simulations d’impact de plaque sur deux explosifs hétérogènes : l’EDC 37 et le PBX9501 [30]. Ces explosifs sont sélectionnés car ils possèdent une porosité différente mais une sensibilité similaire, ce qui suggère que d’autres mécanismes que l’implosion de pores entrent en jeu dans la formation des points chauds. Les microstructures utilisées proviennent de microtomographies. La figure 4.12 illustre l’un d’entre elles.

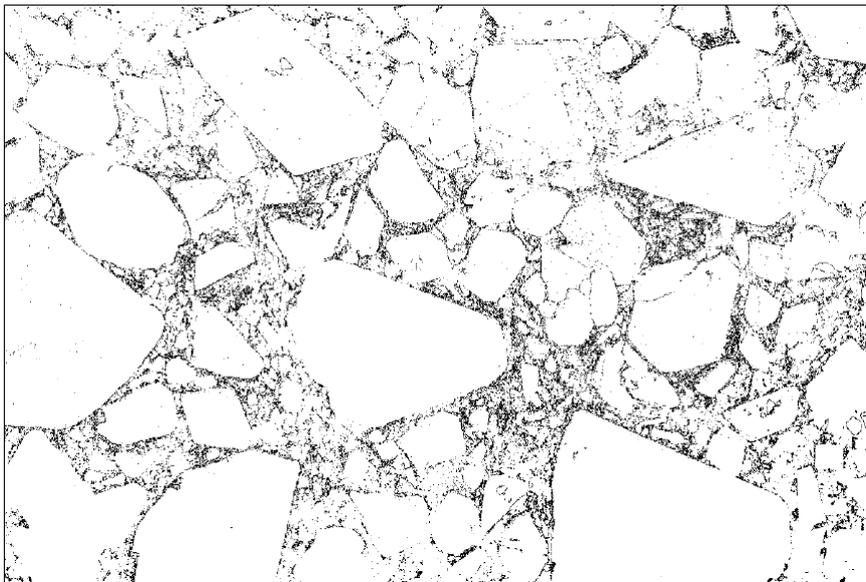


FIGURE 4.12 – Illustration d’une microtomographie du PBX9501 employée par Handley [30].

La modélisation de l'impact est réalisée en projetant la microstructure sur une frontière fixe avec différentes vitesses de projection. Trois configurations sont considérées (voir figure 4.13) :

- des simulations bidimensionnelles représentant toute la microstructure (type A),
- des simulations bidimensionnelles représentant une bande horizontale de la microstructure (type B),
- des simulations unidimensionnelles représentant une ligne verticale de la microstructure (type C).

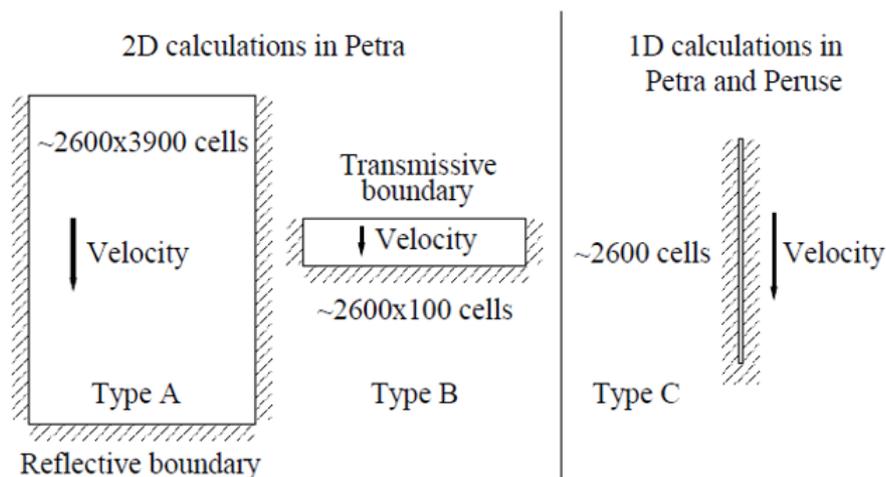


FIGURE 4.13 – Illustration des trois configurations employées dans les travaux de Handley [30].

Ces trois configurations sont employées afin de déterminer l'impact d'une simplification de la microstructure sur les résultats obtenus. Les simulations sont analysées en termes de distribution de température. Cependant, l'attention est principalement portée sur l'aspect global de ces distributions et non sur les queues des distributions, plus représentatives des points chauds. Les distributions de température obtenues en sortie des simulations sont bimodales : elles correspondent en fait à la température sous choc du HMX et du liant, qui possèdent des impédances acoustiques différentes. Cette apparition d'une distribution bimodale de la température est similaire aux résultats obtenus par Kaeshammer [27]. La comparaison des trois configurations testées montre que les microstructures simplifiées présentent un pic de température plus élevé dans le HMX. Cela est en partie dû au fait que la réduction des domaines utilisés les rend plus sensibles aux variations statistiques. Une étude paramétrique est également réalisée sur les simulations unidimensionnelles afin de déterminer la sensibilité des simulations numériques aux différentes grandeurs d'entrée. Elle montre que les simulations sont particulièrement sensibles au choix des capacités calorifiques à volume constant, de la courbe d'Hugoniot employée, mais aussi du coefficient de Gruneisen lorsque l'équation d'état de Gruneisen est employée. La conduction thermique semble n'avoir que très peu d'influence sur les distributions de température. Cette observation est néanmoins réalisée en inerte. Dans le cas de simulations réactives, les réactions chimiques généreraient des gradients de température plus importants, ce qui favoriserait la conduction thermique.

Dans ses travaux, Kaeshammer [27] réalise des simulations eulériennes d'impact de plaques sur des microstructures artificielles ou issues de microtomographies (figure 4.14). Pour générer les microstructures artificielles, les grains des microtomographies sont extraits, analysés morphologiquement et stockés dans une librairie. Cette approche est donc semblable à la méthode de génération employée par Kim *et al.* et Wei *et al.* [102, 103, 106], à la différence que les grains employés proviennent d'une microstructure réelle et non d'une microstructure artificielle. Trois compositions de laboratoire sont étudiées :

- une composition à base de Reduced Sensitivity RDX (RS-RDX). Les cristaux présentent de nombreux défauts intra-granulaire ;
- une composition à base de Raw Very Insensitive RDX (RVI-RDX). Le nombre de défauts intragranulaire a été réduit par rapport au RS-RDX, mais les cristaux présentent des angles aigus ;
- une composition à base de Very Insensitive RDX (VI-RDX). Les cristaux sont de forme arrondie et possède peu de défauts internes.

La vitesse d'impact du projectile est de 1000 m s^{-1} et les simulations sont réalisées en 2D et en 3D. La cinétique chimique, les frottements et l'endommagement ne sont pas pris en compte dans les simulations.

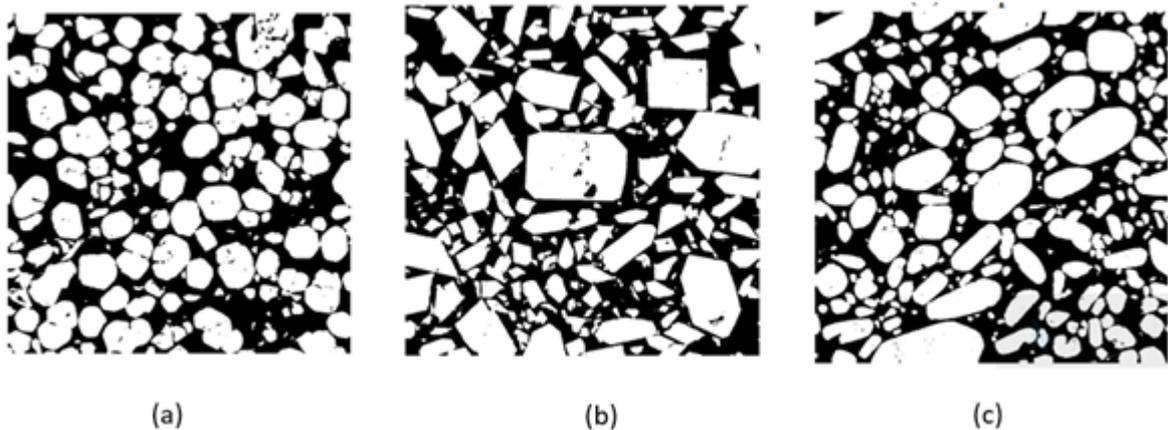


FIGURE 4.14 – Illustration de coupes microtomographiques de RS-RDX (a), RVI-RDX (b) et de VI-RDX (c) employées par Kaeshammer [27].

Les simulations sont analysées en termes de distribution de pression et de température, tout comme dans les travaux de Handley [30]. Les distributions de température sont également tracées en échelle logarithmique afin de permettre une meilleure visualisation des températures élevées, représentatives des points chauds.

Dans un premier temps, les simulations sont réalisées pour les microstructures bidimensionnelles issues de coupes microtomographiques. L'analyse du champ de température montre que l'élévation de température est principalement observée au niveau des porosités intragranulaires et des contacts entre grains. Cette élévation de température est observée bien que le maillage ne soit pas assez résolu pour modéliser les phénomènes d'implosion de pores. Le champ de pression, quant à lui, est très hétérogène et ne semble pas corrélé au champ de température. Les distributions de pression et de température, pour les trois matériaux, sont très semblables sur

une échelle linéaire. Cependant, les queues des distributions de température des trois matériaux indiquent que la proportion de points chauds est plus importante dans le RS-RDX que dans le RVI-RDX (figure 4.15). Le VI-RDX présente la proportion de points chauds la plus faible. Ces résultats obtenus sont proches des résultats expérimentaux. Une légère différence de sensibilité entre le RVI-RDX et le RS-RDX peut tout de même être observée dans les simulations alors qu'ils devraient posséder la même sensibilité. En supprimant les porosités dans les microstructures, des distributions de température similaires sont obtenues pour les trois microstructures. Cela suggère que les différences entre les microstructures ne sont pas assez marquées pour être visibles sur les distributions de température et qu'une étude locale de la température serait requise.

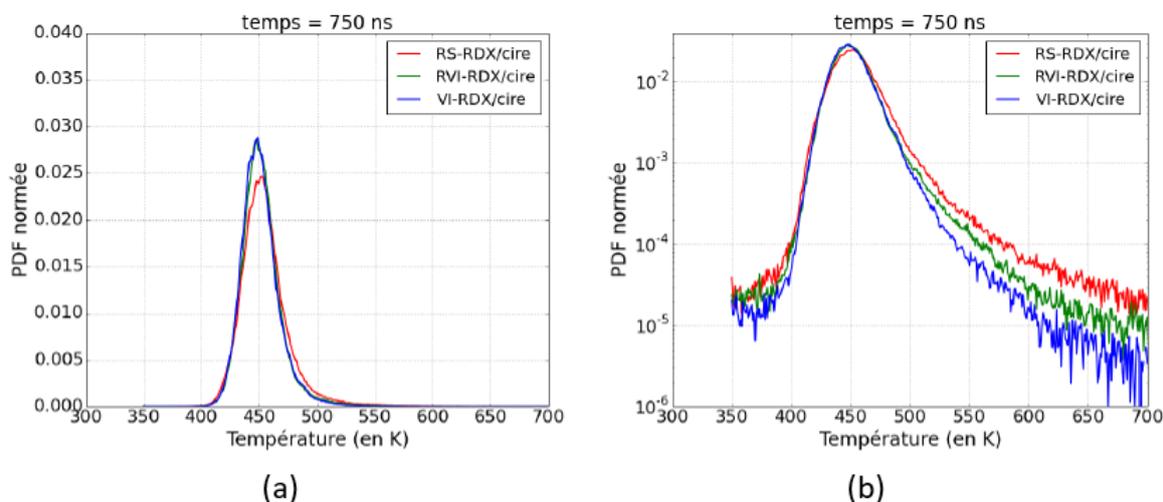


FIGURE 4.15 – Illustration des densités de probabilité de température en échelle linéaire (a) et logarithmique (b) obtenues par Kaeshammer [27]

Des simulations tridimensionnelles sont ensuite réalisées avec les microstructures issues des microtomographies. Les résultats de ces simulations sont alors comparés avec ceux des simulations bidimensionnelles. Les microstructures bidimensionnelles présentent une fraction volumique similaire à celle de la microstructure tridimensionnelle. L'analyse et la comparaison de ces simulations révèlent une différence notable entre les distributions de température et de pression obtenues pour les microstructures bidimensionnelles et tridimensionnelles. Ces différences sont plus marquées pour les distributions de pression. Des simulations tridimensionnelles sont également réalisées avec des microstructures artificielles à partir de la librairie de grains [27]. Deux microstructures sont générées, avec une sélection basée sur l'indice de sphéricité de Wadell afin de disposer de grains avec des morphologies différentes. Cependant, presque aucune différence n'est notée concernant les distributions de température obtenue : soit les différences de forme des grains ne sont pas assez marquées, soit les distributions ne sont pas adaptées pour la détection de ces différences. Il est également possible que l'influence de la forme des grains sur les résultats des simulations ne soit pas détectée avec la modélisation réalisée.

Des simulations d'impact de plaque intégrant une modélisation de l'anisotropie des cristaux énergétiques sont réalisées par Wang *et al.* en 2017 [93]. Les réactions chimiques de décomposition du HMX sont modélisées. La microstructure employée pour réaliser les simulations est générée par une tessellation de Voronoï bidimensionnelle qui est ensuite extrudée pour obtenir une microstructure tridimensionnelle avec une seule couche de grains. Un modèle anisotropique est développé pour les grains de HMX et une orientation aléatoire est associée à chaque grain. Différentes vitesses d'impact allant de 100 m s^{-1} à 600 m s^{-1} sont considérées. La cinétique est représentée par une loi d'Arrhenius en température. Il est observé que les grains de HMX subissent davantage de déformation plastique à proximité de l'impacteur et sont plus susceptibles d'être cisailés selon une orientation spécifique. Le choc étant soutenu, les cristaux proches de l'impacteur subissent un chargement continu, ce qui entraîne une localisation d'énergie et des réactions chimiques plus importantes à cet endroit. Ces résultats sont cohérents avec ceux obtenus par Barua *et al.* [99]. De plus, les réactions chimiques sont principalement localisées en bordure de grain. En effet, les discontinuités d'impédance acoustique entre le liant et le HMX entraînent des réflexions d'onde de contraintes successives, ce qui favorise les réactions chimiques. Les réactions chimiques qui ont lieu dans la microstructure sont très localisées. Pour une vitesse d'impact de 400 m s^{-1} , la fraction massique de HMX réagi dans la microstructure ne dépasse pas 0.016 en moyenne tandis qu'elle atteint une valeur de 0.3 dans certaines mailles (figure 4.16).

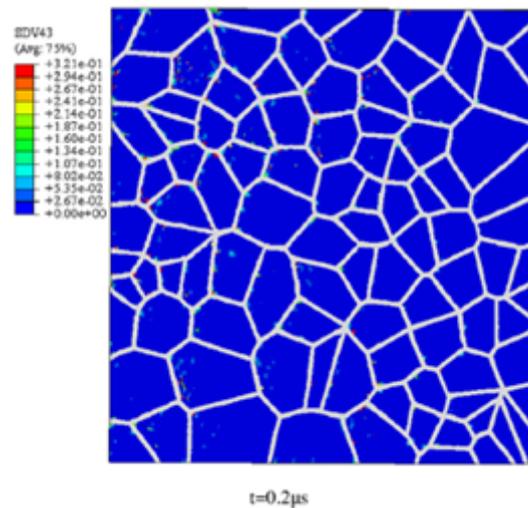


FIGURE 4.16 – Illustration du champ de fraction brûlée de HMX observé par Wang *et al.* dans la microstructure suite à un impact de 600 m s^{-1} [93].

Le résultat des simulations réalisées par Wang *et al.* [93] diffère de ceux obtenus par Wei *et al.* [106], où l'apparition du premier point chaud s'accompagnait d'une propagation des réactions chimiques assez importante. Ici, aucune propagation ne semble s'établir. Cela est probablement dû à l'absence de conduction thermique dans les simulations de Wang *et al.*.

4.2.3 Étude de la TCD

En complément des études réalisées sur l’amorçage des explosifs, des travaux sur la TCD à l’échelle mésoscopiques ont également vu le jour. Ce champ d’étude, plus récent, a émergé à la fin des années 2010 et se focalise principalement sur les mécanismes d’effondrement de pores. Encore une fois, on retrouve le laboratoire de Georgia Tech comme principal contributeur de cette approche.

Résultats des études réalisées au sein de Georgia Tech

Dans la section précédente, nous avons pu voir que les travaux au sein du laboratoire de Georgia Tech étaient principalement destinés à la détermination des seuils d’amorçage à l’échelle mésoscopique. Néanmoins, dès la fin des années 2010, une volonté du laboratoire d’appliquer l’approche mésoscopique à l’étude de la TCD semble émerger. L’objectif principal est de déterminer une probabilité de transition choc-détonation vis-à-vis de la microstructure. Contrairement aux travaux réalisés auparavant, le laboratoire se focalise désormais sur l’effondrement de pores comme mécanisme de formation de points chauds.

En 2019, une première étude de la TCD est réalisée en couplant CODEX avec le code de calcul eulérien LESLIE [107]. Cette étude peut être vue comme une approche hybride puisque les calculs mésoscopiques sont réalisés sans réactivité avec CODEX afin d’alimenter des simulations réactives macroscopiques avec le code LESLIE. Une nouvelle grandeur, appelée intensité de point chaud et notée χ , est introduite dans les simulations réalisées avec CODEX. Son expression est $\chi = \frac{T_{pointchaud} - T_0}{T_{max} - T_0}$, avec T_{max} la température maximale dans la microstructure et T_0 sa température initiale. Elle sert de donnée d’entrée au code de calcul LESLIE. Le champ d’intensité des points chauds permet de déterminer les sites où l’énergie est préférentiellement déposée dans la microstructure.

Des microstructures tridimensionnelles sont générées par tessellation de Voronoï et des simulations lagrangiennes sont réalisées avec CODEX pour différentes vitesses d’impact. Contrairement aux simulations réalisées précédemment, seul l’effet de la microstructure est pris en compte. Ni l’endommagement, ni la friction ne sont donc considérés dans les simulations. En analysant le champ d’intensité des points chauds, Wei *et al.* remarquent que celui-ci ne varie que très peu en fonction du temps et de la vitesse d’impact (figure 4.17). Des simulations eulériennes sont ensuite réalisées avec une modélisation homogène utilisant le champ d’intensité des points chauds calculé avec CODEX comme donnée d’entrée. Ce dernier est employé pour pondérer la cinétique de l’explosif, issue d’une calibration réalisée pour du PBX9501. Avec cette méthodologie, les auteurs définissent un Pop-Plot dit « probabiliste » permettant de définir une probabilité de TCD au regard de la microstructure.

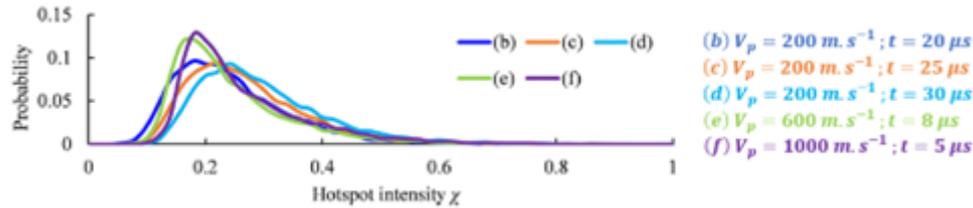


FIGURE 4.17 – Illustration des champs d'intensité de points chauds observés par Wei *et al* [107] pour différents temps et différentes vitesses d'impact, dans une section d'une microstructure.

Par la suite, cette méthodologie de couplage n'a pas été réemployée. Désormais, c'est le code CTH qui est utilisé par le laboratoire de Georgia Tech pour réaliser des simulations de TCD à l'échelle mésoscopique. De même, les efforts sont désormais portés sur l'influence de l'implosion de pores sur la TCD.

Ainsi, Miller *et al.* [108] étudie la TCD pour du HMX comprimé à la TMD et pour du HMX comprimé poreux. Des microstructures monomodales sont générées *via* une tessellation de Voronoi. Pour le HMX poreux, les pores sont supposés sphériques avec un diamètre de 50 μm . Les fractions volumiques de pores considérées vont de 0% à 20%. Plusieurs configurations sont étudiées (voir figure 4.18) :

- une configuration où le HMX comprimé est non poreux, avec une masse volumique homogène (H) ;
- une configuration où le HMX comprimé est non poreux, avec une masse volumique variable (M). À chaque cristal est attribué une masse volumique de 70%, 100% ou 130% de la TMD afin que les hétérogénéités non considérées dans le calcul puissent être prises en compte (pores de diamètre inférieur à 50 microns, anisotropie, etc.) tout en conservant une masse volumique moyenne à 100% de la TMD ;
- une configuration où le HMX comprimé est poreux avec une masse volumique constante (V). Dans ce cas, trois fractions volumiques de pores sont considérées : 5%, 10% et 20% ;
- une configuration où le HMX comprimé est poreux avec une masse volumique variable à l'instar du HMX non poreux ci-dessus (M+V).

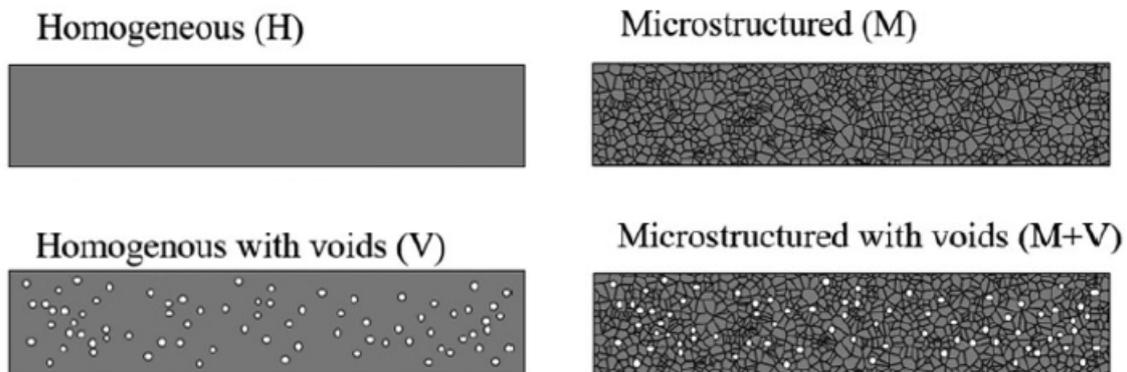


FIGURE 4.18 – Illustration des configurations employées dans les travaux de Miller *et al.* [108].

Des simulations bidimensionnelles d'impact de plaque sont ensuite réalisées pour chacune de ces configurations et pour différentes vitesses d'impact. La réactivité du HMX est modélisée par une cinétique HVRB dépendante de la pression. Pour chaque composition, le Pop-Plot est ensuite tracé et employé comme outil d'analyse. Dans les simulations, l'onde de détonation apparaît en aval du choc incident et finit par le rattraper. La profondeur de transition est alors définie comme la profondeur à laquelle l'onde de détonation rattrape le front de choc incident (figure 4.19). Cette définition de la profondeur de transition sera reprise par Miller *et al.*[109] ainsi que Coffelt *et al.* [120]. Comme nous avons pu le voir en section 2.1, la formation d'une onde de détonation dans l'écoulement aval au choc est davantage représentative du comportement d'un explosif homogène [109]. Cette phénoménologie semble également apparaître dans les études réalisées ultérieurement au sein du laboratoire de Georgia Tech.

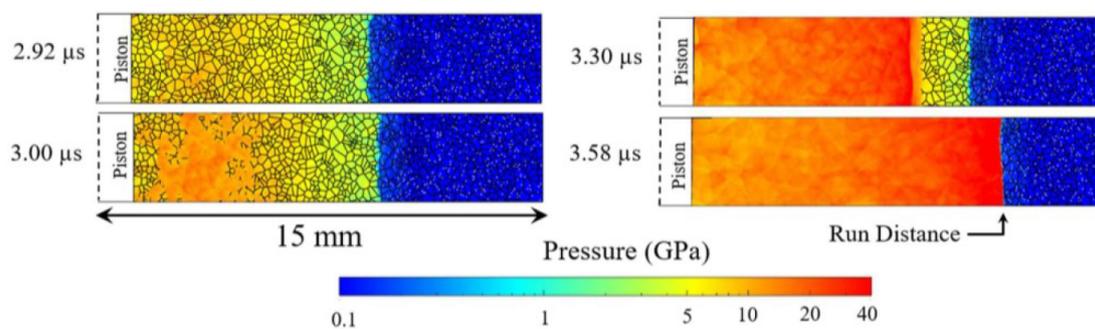


FIGURE 4.19 – Illustration de l'apparition d'une détonation en aval du front de choc dans les simulations réalisées par Miller *et al.* [108].

Pour les microstructures avec des cristaux de masse volumique constante, la sensibilité au choc des échantillons est plus élevée pour des fractions volumiques de pores importantes. Ces résultats sont cohérents avec les observations expérimentales réalisées par Borne *et al.*[33]. En comparant le Pop-Plot des échantillons non poreux à ceux des échantillons avec une porosité à 5%, on constate que la porosité a plus d'influence sur la sensibilité au choc que les hétérogénéités de masse volumique dans les cristaux. Une comparaison des Pop-Plots obtenus numériquement avec des Pop-Plots expérimentaux est ensuite réalisée. Les simulations, bien qu'elles ne permettent pas de restituer les données expérimentales, semblent bien restituer l'augmentation de la sensibilité vis-à-vis de la porosité.

Ces travaux ont ensuite été étendus à des simulations tridimensionnelles [109]. Les mêmes tendances sont alors observées en terme de sensibilité au choc que celles obtenues dans l'étude 2D [108]. À l'exception de l'échantillon homogène de HMX non poreux, les Pop-Plots obtenus par Miller *et al.* [109] en 3D diffèrent de ceux obtenus en 2D. Ces résultats montrent l'importance de la dimension dans les simulations de TCD, ce qui rejoint les travaux de Kaeshammer [27] et de Handley [30] sur la formation des points chauds.

L'étude des effets de la porosité sur la TCD se poursuit avec les travaux de Coffelt *et al.* [120] qui considèrent désormais des explosifs composés à 75% cristaux de pentrite et à 25% d'un liant inerte en PBHT. L'objectif est alors de déterminer comment la TCD est affectée si les pores sont positionnés dans les cristaux, dans le liant ou à l'interface entre les cristaux et le liant.

Pour cela, des microstructures monomodales 3D sont générées par tessellation de Voronoi. Une fraction de pores à hauteur de 10% du volume total de l'échantillon est générée et introduite dans la microstructure. Tous les pores introduits possèdent un diamètre de 50 μm et peuvent s'entrecouper. Seuls les pores dans la phase d'intérêt sont conservés et on aboutit à quatre configurations (voir figure 4.20) :

- une configuration sans porosité, servant de référence ;
- une configuration où les pores ne sont localisés que dans le liant et la fraction volumique de pores dans l'échantillon est de 2.5% ;
- une configuration où les pores ne sont localisés que dans les cristaux de pentrite et la fraction volumique de pores dans l'échantillon est de 7.5% ;
- une configuration où les pores peuvent être localisés aussi bien dans le liant que dans les cristaux énergétiques. La fraction volumique de pores dans l'échantillon est de 10%.

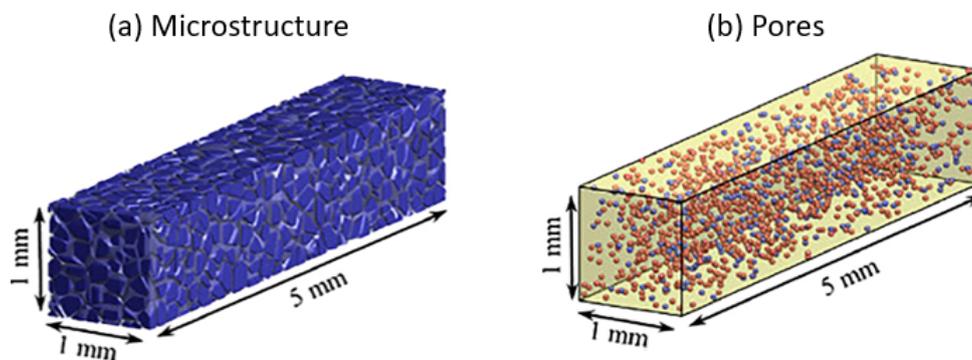


FIGURE 4.20 – Illustration d'une microstructure (a) et d'une population de pores (b) issues des travaux de Coffelt *et al.* [120]. Les pores colorés en bleu sont situés dans le liant tandis que ceux colorés en rouge sont situés dans les cristaux énergétiques.

Des simulations d'impact de plaque sont ensuite réalisées à différentes vitesses d'impact. Cette fois-ci, une cinétique de type ARB [121] est utilisée pour modéliser les réactions chimiques. Les Pop-Plots de chaque configuration sont ensuite comparés. La sensibilité la plus faible est obtenue pour la microstructure de référence, *i.e.* sans porosités, suivie des échantillons avec les pores situés uniquement dans le liant. Les échantillons avec les pores situés dans le liant et dans les cristaux sont plus sensibles que ceux avec des pores uniquement dans le liant. Enfin, la sensibilité la plus élevée est observée pour la microstructure avec les pores situés uniquement dans les cristaux. Comparé à la microstructure de référence, l'introduction de 2.5% de pores dans le liant induit, en moyenne, une réduction de 53% de la profondeur de transition. En revanche, une composition avec 10% de pores répartis dans les cristaux et dans le liant est moins sensible qu'une composition avec 7.5% de pores uniquement dans les cristaux. Ce comportement est attribué au fait qu'une porosité importante entraîne une pression plus faible dans l'explosif aux instants suivants l'impact.

La dernière étude en date portant sur la TCD à l'échelle mésoscopique, et ayant été réalisée au sein du laboratoire de Georgia Tech par Olsen *et al.* [122], explore le concept d'explosif à taux de chargement variable (*FGEM*^b en anglais). Pour cette étude, des microstructures monomodales composées de 75% de HMX et de 25% d'Estane sont générées avec des tessellations de Voronoi.

b. « Functionally Graded Energetic Materials »

De la porosité est ensuite introduite dans la microstructure selon plusieurs configurations (voir figure 4.21) :

- trois microstructures ont une fraction volumique de pores de 1%, 5.5% et 10%. Dans ces microstructures, les pores sont répartis uniformément ;
- une microstructure avec une fraction volumique de pores variant spatialement. À proximité de la face d'impact, la fraction volumique de pores est de 1%. Elle augmente progressivement jusqu'à atteindre une fraction volumique de 10% au niveau de la face arrière de la microstructure. Nous référerons à ce groupe de microstructures sous le nom de « groupe A » ;
- une microstructure avec une fraction volumique de pores variant spatialement, en sens inverse de la précédente. À proximité de la face d'impact, la fraction volumique de pores est de 10%. Elle diminue progressivement jusqu'à atteindre une fraction volumique de 1% au niveau de la face arrière de la microstructure. Nous référerons à ce groupe de microstructures sous le nom de « groupe B » ;

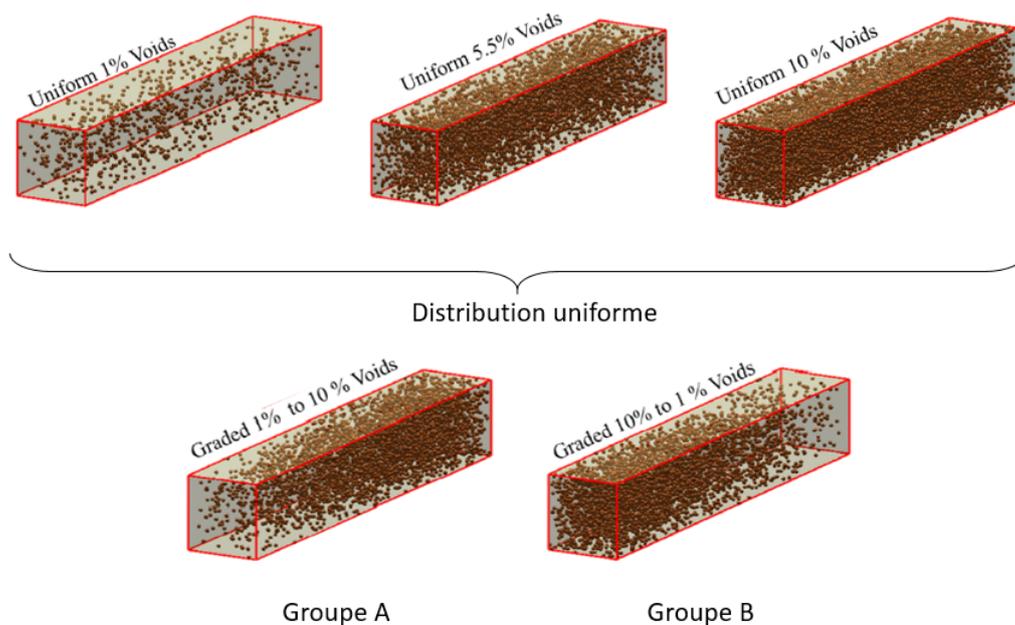


FIGURE 4.21 – Illustration des configurations employées dans les travaux d'Olsen *et al.* [122].

Des simulations d'impact de plaque sont ensuite réalisées à différentes vitesses d'impact. Comme dans les travaux réalisés par Coffelt *et al.* [120], une cinétique de type ARB [121] est utilisée pour modéliser les réactions chimiques. Deux jeux de paramètres sont employés pour la cinétique : l'un issu de la littérature, et l'autre provenant d'une calibration réalisée avec la microstructure à 1% de porosité uniforme afin de restituer le Pop-Plot du PBX-9501. La profondeur de transition est cette fois-ci définie comme la distance nécessaire pour que l'onde de détonation atteigne une vitesse constante, supérieure à celle de l'onde de choc incidente. À l'issue des simulations, les Pop-Plots obtenus pour chaque composition sont construits. Le jeu de paramètres employé pour la cinétique n'a aucune influence sur les tendances observées, mais permet d'approcher le Pop-Plot du PBX9501 pour la composition avec une porosité uniforme

de 1%. Comme observé par Miller *et al.* [108, 109], les compositions avec une porosité uniforme importante sont plus sensibles au choc. La sensibilité au choc des microstructures du groupe A est intermédiaire, entre celle des compositions avec une porosité uniforme de 1% et 5.5%. En revanche, la sensibilité des microstructures du groupe B apparaît comme quasiment identique à celle obtenue pour une porosité uniforme de 10%. Ces résultats sont particulièrement intéressants puisqu'ils suggèrent qu'en contrôlant la répartition spatiale des hétérogénéités dans les microstructures, il serait possible de moduler la sensibilité au choc d'un explosif.

Bien que cela ne soit pas mentionné, l'explosif semble présenter un comportement partiellement homogène (figure 4.22). Dans un premier temps, la vitesse du choc est constante. Au bout d'un certain temps, la vitesse du choc se met à augmenter progressivement, ce qui est caractéristique des explosifs hétérogènes. Un saut de vitesse de choc apparaît ensuite, achevant la TCD de l'explosif. Bien que cela ne soit pas explicitement précisé dans l'article, un tel comportement suggère qu'une onde de détonation s'est formée dans l'écoulement aval et a rattrapé le choc incident, tel qu'observé avec la cinétique HVRB employée dans les travaux de Miller [108, 109]. Dans la publication de Miller *et al.* [109], ce comportement était attribué à l'emploi d'une cinétique dépendante de la pression, dont la calibration est généralement réalisée pour retranscrire la détonation macroscopique d'un explosif.

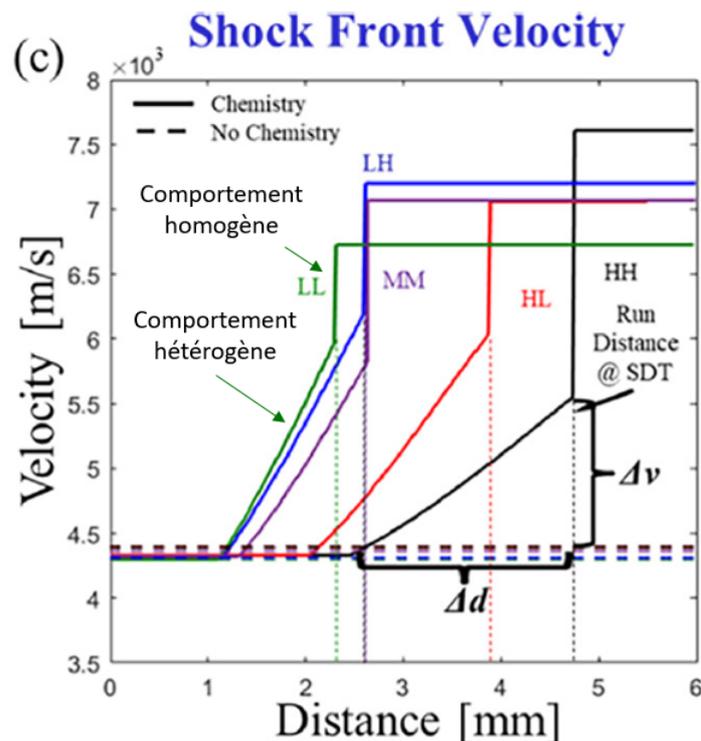


FIGURE 4.22 – Illustration des profils de vitesse de choc issus des simulations d'Olsen *et al.* [122].

Études réalisées parallèlement aux travaux de Georgia Tech

D'autres études mésoscopiques émergent au sein de la communauté scientifique parallèlement aux travaux de Georgia Tech.

Les travaux de Choi *et al.* [123] se focalisent sur la TCD de deux compositions : un explosif composé à 95% de HMX et à 5% d'Estane ainsi qu'un explosif aluminisé composé de HMX à 55%, d'aluminium et de liant. Bien que cela ne soit pas précisé explicitement, l'explosif à 95% de HMX semble correspondre à la composition PBX-9501^c. Pour l'explosif à 95% de HMX, des simulations bidimensionnelles représentant un impact sur une charge cylindrique avec une surface libre sont réalisés. Dans ces simulations, la microstructure de l'explosif est représentée par du HMX homogène dans lequel ont été introduits des grains de liant (figure 4.23.a). Les résultats des simulations sont ensuite comparés à une simulation réalisée dans les mêmes conditions mais en modélisation homogène. Pour l'explosif aluminisé, des simulations sont réalisées en 2D ainsi qu'en 3D. Le cylindre est cette fois-ci supposé infini et la configuration s'apparente donc davantage à un impact de plaque classique. Pour cet explosif, la microstructure est représentée par des grains de HMX et des particules d'aluminium entourés d'un liant (figure 4.23.b). Une cinétique du type Ignition & Growth est employée pour modéliser la réactivité du HMX pur et du PBX-9501 homogène tandis que celle de l'aluminium est modélisée par une loi d'Arrhénus.

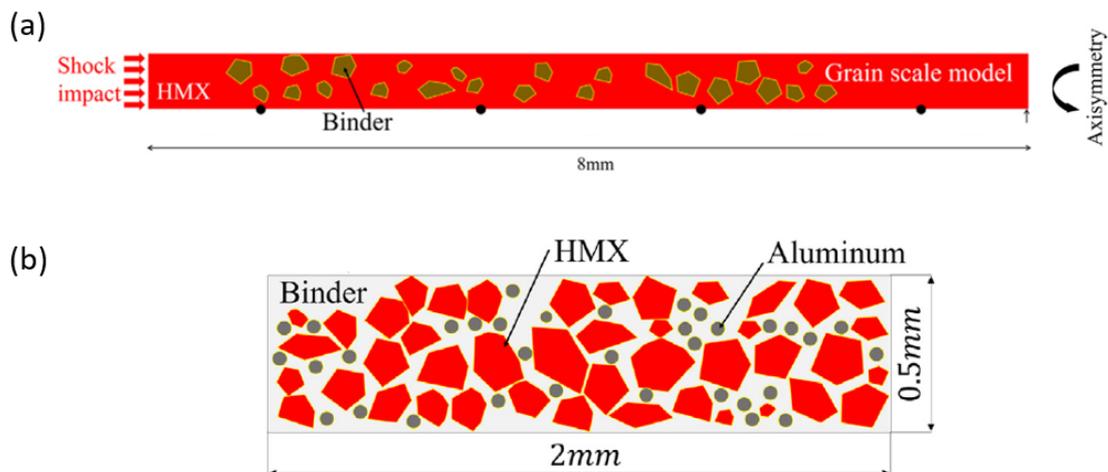


FIGURE 4.23 – Illustration des configurations étudiées dans les travaux de Choi *et al.*.

Les simulations réalisées avec le PBX9501 montrent une bonne concordance des relations célérité-courbure obtenues avec le modèle continu, le modèle mésoscopique et les données expérimentales. La comparaison des signaux de pression obtenus à quatre positions dans les simulations soulignent l'interaction complexe des ondes de compression avec les grains de liant dans le modèle mésoscopique, ce qui n'est pas observé pour le modèle continu. Une comparaison des Pop-Plots obtenus pour chaque modélisation avec des données expérimentales est également réalisée. Le modèle mésoscopique permet alors de mieux restituer l'expérience que le modèle continu (figure 4.24). Cependant, aucune information n'est donnée sur le critère employé pour déterminer

^c. Le PBX-9501 est lui aussi composé de 95% de HMX et d'un liant en Estane. De plus, la comparaison des résultats des simulations est réalisée au regard du Pop-Plot du PBX-9501.

la profondeur de transition.

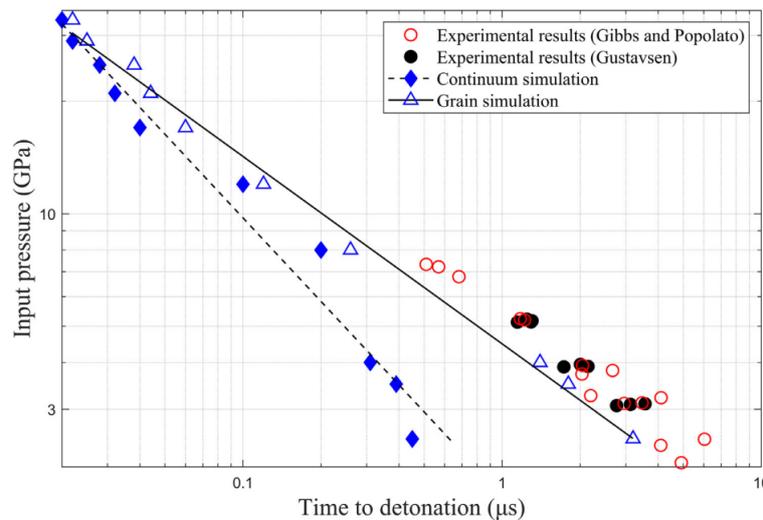


FIGURE 4.24 – Illustration du Pop-Plot obtenu par Choi *et al.* [123].

Pour les simulations réalisées avec l'explosif à 55% de HMX, l'étude est davantage qualitative. Pour une vitesse d'impact de 1500 m s^{-1} , le HMX réagit entièrement tandis que l'aluminium ne réagit quasiment pas. En revanche, pour une vitesse d'impact de 3000 m s^{-1} , le HMX et l'aluminium atteignent tous deux une fraction brûlée de 1.

Plus récemment, Gallier [124] a réalisé des simulations mésoscopiques de TCD en utilisant une méthode de maillage mobile afin de réduire les coûts de calcul. L'étude se focalise sur le mécanisme d'implosion de pores appliqué à une composition de HMX comprimé ainsi qu'à un PBX composé de 82 % de HMX et d'un liant en PHBT. Pour modéliser les réactions chimiques dans l'explosif, une loi d'Arrhénius est employée. Dans un premier temps, un pore est isolé dans du HMX comprimé à la TMD. En faisant varier la taille du pore, Gallier montre que l'explosif ne transite pas en détonation pour des diamètres faibles. En revanche, pour un diamètre plus important, un pore isolé est suffisant pour conduire à la détonation de l'explosif. Une population de pores est ensuite introduite dans les échantillons de HMX comprimé à hauteur de 2% en fraction volumique. Le diamètre des pores introduits est de $10 \mu\text{m}$. Bien que le diamètre de ces pores soit bien inférieur au diamètre critique déterminé préalablement, la TCD de l'explosif est observée. Les profondeurs de transition obtenues sont du même ordre de grandeur que le Pop-Plot expérimental. Une simulation de HMX non poreux est également réalisée et montre une bonne cohérence avec le Pop-Plot expérimental d'un cristal de HMX isolé.

Une étude paramétrique est ensuite menée sur la fraction volumique de pores à diamètre fixé. À l'instar des travaux de Miller *et al.* [108, 109], une fraction volumique de pores élevée est corrélée avec une sensibilité au choc plus importante. En outre, une étude paramétrique menée sur la taille des pores à fraction volumique fixée montre une sensibilité plus importante lorsque la taille des pores est faible. Plusieurs formes de pores ont également été étudiées (voir figure 4.25) mais peu d'influence est observée sur la TCD. Ces résultats diffèrent de ceux obtenus par Li *et al.* [36] qui montrent une influence de la forme des pores sur le mécanisme d'effondrement.

Ces différences sont expliquées par le fait que les pores sont orientés aléatoirement dans l'étude de Gallier [124]. La forme des pores influence les mécanismes d'effondrement localement mais n'induit pas, en moyenne, de différence significative sur la TCD.

Une étude paramétrique de la fraction volumique de pores a également été réalisée pour la composition à base de HMX et de PBHT. De même que pour le HMX comprimé, une porosité importante est corrélée avec une sensibilité au choc accrue. Pour une même fraction volumique de pores, la sensibilité au choc est plus élevée si les pores sont situés dans les cristaux de HMX que dans le PBHT. La sensibilité au choc d'un échantillon non poreux est quant à elle plus faible que celle d'un échantillon avec des pores situés dans le liant. Ces résultats sont cohérents avec ceux obtenus par Coffelt *et al.* [120].

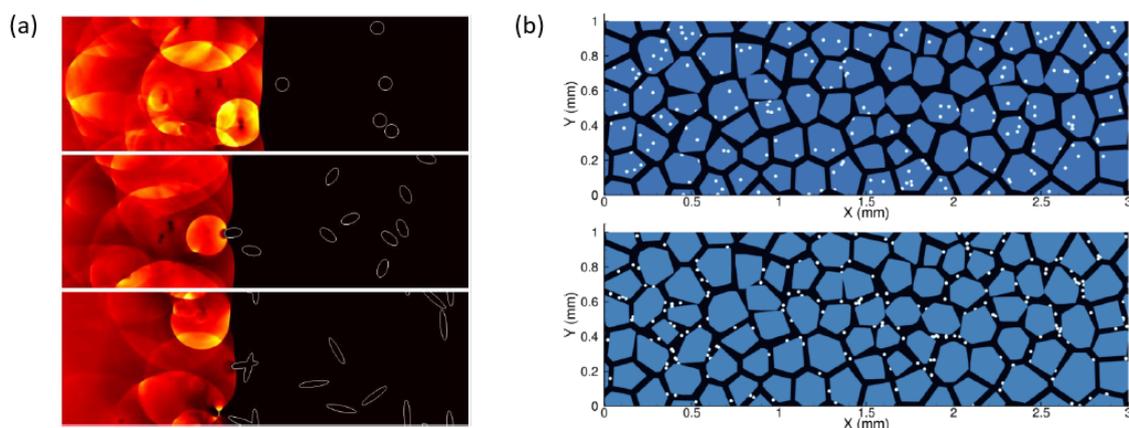


FIGURE 4.25 – Illustration des configurations étudiées par Gallier [124] pour des échantillons de HMX comprimé (a) ainsi que des échantillons d'un explosif à base de HMX et de PBHT (b).

Des simulations mésoscopiques ont également été réalisées par Miller *et al.* [95] avec le code de calcul ALE3D du Lawrence Livermore National Laboratory (LLNL) afin d'étudier la TCD des explosifs hétérogènes. Contrairement à ce qu'indique le nom du code de calcul employé, les microstructures employées sont bidimensionnelles. Elles sont générées par tessellation de Voronoï et sont bimodales (figure 4.26). De la porosité est ensuite introduite à hauteur de 2% et le diamètre des pores est fixé à 3 μm . Les simulations sont réalisées sur plusieurs microstructures et les chocs générés par l'impacteur sont non soutenus. Plusieurs épaisseurs d'impacteur sont employées, chacune étant associée à une vitesse d'impact. Le choix des vitesses d'impact et des épaisseurs d'impacteur sont issues de travaux expérimentaux. La cinétique chimique est prise en compte dans le code de calcul et est modélisée par une loi d'Arrhenius modifiée. Cette loi d'Arrhénius est calibrée de sorte que 50% des microstructures générées atteignent la TCD pour chaque épaisseur d'impacteur. Selon l'épaisseur de l'impacteur considérée, un jeu de paramètres différent est donc obtenu. La détonation de l'explosif n'est cette fois-ci pas déterminée à partir de la profondeur de transition, mais à partir des profils de température obtenus par des jauges lagrangiennes numériques. Si 80% des jauges lagrangiennes mesurent une température supérieure à une valeur seuil, alors les auteurs considèrent que l'explosif finira par transiter en détonation. Contrairement au Pop-Plot, on a ici un critère de détonation binaire : soit l'échantillon a détoné, soit le choc n'a pas évolué en détonation. Au regard de ce critère, l'étude porte donc sur la

détermination d'un seuil de TCD correspondant à la détonation de 50% des microstructures soumises à un choc ainsi que sur l'évolution de ce seuil vis-à-vis des différents paramètres de la simulation.

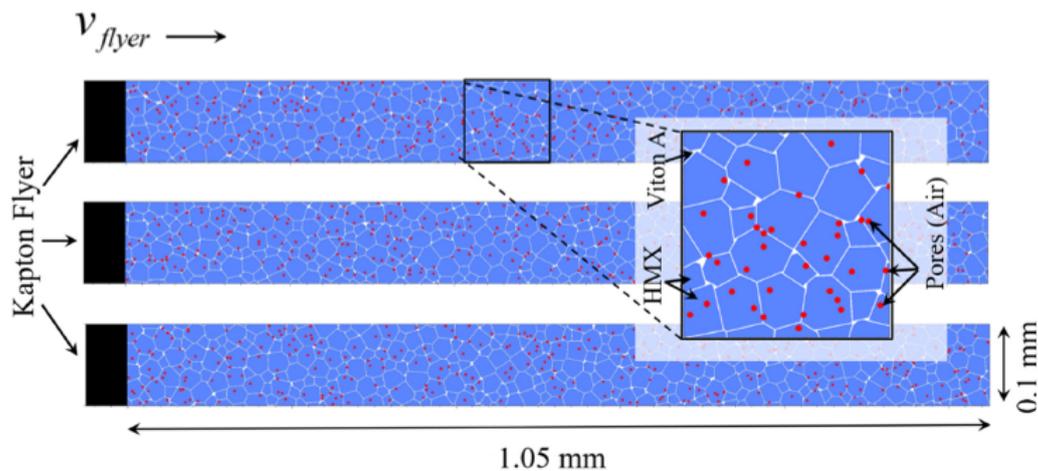


FIGURE 4.26 – Illustration des configurations étudiées dans les travaux de Miller *et al.* [95].

Une étude paramétrique est réalisée afin de déterminer l'influence de la porosité et de la cinétique chimique sur le seuil de TCD. Il est ainsi montré que le seuil de TCD présente davantage de variations pour des vitesses d'impact faibles. Cela indique que les microstructures des explosifs jouent un rôle plus important dans la réponse de l'explosif pour des faibles vitesses. L'influence de la porosité sur le seuil de TCD est similaire pour toutes les vitesses d'impact considérées.

4.3 Modèles hybrides

Dans la littérature, certains modèles peuvent être qualifiés d'hybrides ou de multi-échelle.

L'université d'Iowa développe ainsi un modèle de TCD appelée "MES-IG". Ce modèle réactif est en fait un modèle macroscopique type "Ignition & Growth" dont les paramètres sont déterminés à partir de simulations mésoscopiques d'implosion de pores isolés et en interaction. Pour alimenter le modèle, les porosités étudiées sont extraites de microstructures réelles et de microstructures générées par intelligence artificielle.

Une approche originale dans le traitement des points chauds a également été réalisée à l'Institut de Technologie de Floride. Une série de travaux à l'échelle mésoscopique avec réactivité a ainsi été publiée [125], dont l'objectif est de déterminer si un point chaud croît ou s'éteint après le passage du choc. Pour cela, des microstructures sont générées avec de la porosité. Le modèle réactif intègre la cinétique des cristaux énergétiques à laquelle s'additionne un terme dit "microscopique" issu de simulations d'implosion de pores et dont l'activation n'est réalisée que dans les porosités. Lors des simulations, le passage du choc et l'effondrement des pores ne sont donc pas directement simulés. Une pression "post-choc", qui est une donnée d'entrée du modèle, est induit dans tout le domaine d'étude. Les auteurs peuvent ainsi étudier quelles sont

les porosités qui s'éteignent ou s'emballent dans l'écoulement après le passage du choc.

4.4 Synthèse

Au cours de ce chapitre, nous avons pu explorer les différentes approches pouvant être rencontrées pour modéliser la TCD des explosifs. Afin de dégager les spécificités des différents modèles établis, nous avons adopté la classification des différents modèles en générations telle que proposée par Chuzeville [1] et reprise par Elia [2]. Dans un premier temps, nous avons introduit les modèles dits "macroscopiques", dans lesquels l'explosif est représenté comme un matériau homogène. Pour retranscrire la TCD, ces modèles sont calibrés à partir de données expérimentales. Si les modèles de première génération sont basés sur une description empirique de la TCD, la deuxième et troisième génération sont formulées à partir d'hypothèses et de considérations physiques sur les mécanismes d'apparition et de croissance des points chauds. Pour une description plus détaillée des modèles macroscopiques de TCD, le lecteur pourra se référer aux travaux de Chuzeville [1] et Elia [2].

Désormais, les efforts de la communauté scientifique semblent s'orienter vers une quatrième génération de modèle d'amorçage par l'approche mésoscopique. Cette nouvelle approche consiste à modéliser explicitement les hétérogénéités de l'explosif. C'est un champ de recherche encore récent et, à l'heure actuelle, les travaux réalisés ne semblent pas encore capables de restituer convenablement la TCD des explosifs solides. Malgré ces difficultés, l'approche mésoscopique permet de mieux comprendre comment les hétérogénéités de l'explosif interagissent avec une onde de choc et contribuent à la transition du choc en détonation.

Parmi les travaux réalisés à l'échelle mésoscopique, il est possible de distinguer deux courants complémentaires. Le premier courant est dédié à la compréhension des mécanismes d'apparition de points chauds. À l'heure actuelle, la plupart de ces travaux est réalisée sans réactivité. La détection des points chauds est alors effectuée *via* des critères sur la température. Les mécanismes étudiés sont variés. Au sein du laboratoire de Georgia Tech, les travaux se sont focalisés sur l'apparition de points chauds par friction le long des fissures et des sites de décohesion [98, 101, 103, 107]. Dans les simulations réalisées, les points chauds sont principalement localisés à proximité de l'impacteur. Une influence de la vitesse d'impact du projectile sur les mécanismes de formation des points chauds a également été observée en étudiant des microstructures présentant des défauts internes. Ainsi, à faible vitesse d'impact, la nature des défauts influence fortement l'apparition des points chauds. En revanche, son rôle est secondaire pour des vitesses d'impact élevées et ce sont les propriétés morphologiques inhérentes à la microstructure qui pilotent la formation des points chauds. Une validation des critères de détection des points chauds a également été réalisée avec des simulations réactives.

Des travaux complémentaires aux études de Georgia Tech ont vu le jour dans la littérature. Ces travaux ont montré une influence notable du nombre de dimensions géométriques considérées sur les résultats des simulations numériques [27, 30]. Les travaux de Kaeshammer [27] ont révélé

qu'une élévation de température plus importante est observée au contact entre deux cristaux et au sein des porosité intragranulaires. Des simulations numériques avec un modèle anisotrope de cristaux ont également été réalisées [93]. Avec ce modèle, les points chauds induits dans la microstructure sont très localisés et apparaissent principalement en bordure de grain.

Le second courant porte sur la modélisation de la TCD et se rapproche donc des modèles de TCD macroscopiques. Les travaux réalisés sont encore principalement exploratoires. Il s'agit généralement d'études paramétriques visant à déterminer les paramètres favorisant la TCD. Ils se focalisent *quasi* exclusivement sur les mécanismes d'implosion de pores. Les simulations sont généralement réalisées avec des modèles réactifs dépendants de la pression. Cependant, l'emploi de ces modèles réactifs semble induire l'apparition d'une onde de détonation dans l'écoulement aval au choc incident, ce qui est davantage caractéristique des explosifs homogènes que des explosifs hétérogènes (voir section 2.1). Les résultats obtenus montrent une dépendance de la TCD à la porosité [95, 108, 109, 120, 122-124]. Comme attendu, plus un explosif présente une forte porosité, plus celui-ci sera sensible. Pour des explosifs composés de cristaux et de liant, la sensibilité au choc est également influencée par la nature de la porosité, *i.e.* intragranulaire ou extragranulaire [120, 124], ce qui rejoint les observations expérimentales faites par Borne *et al.* [33]. En revanche, la forme des pores apparaît comme n'ayant que très peu d'impact sur la TCD [124].

Un schéma récapitulatif de l'état de l'art de l'approche mésoscopique est présenté en figure 4.27. Une synthèse des microstructures employées dans les études présentées dans ce chapitre est disponible en annexe B.

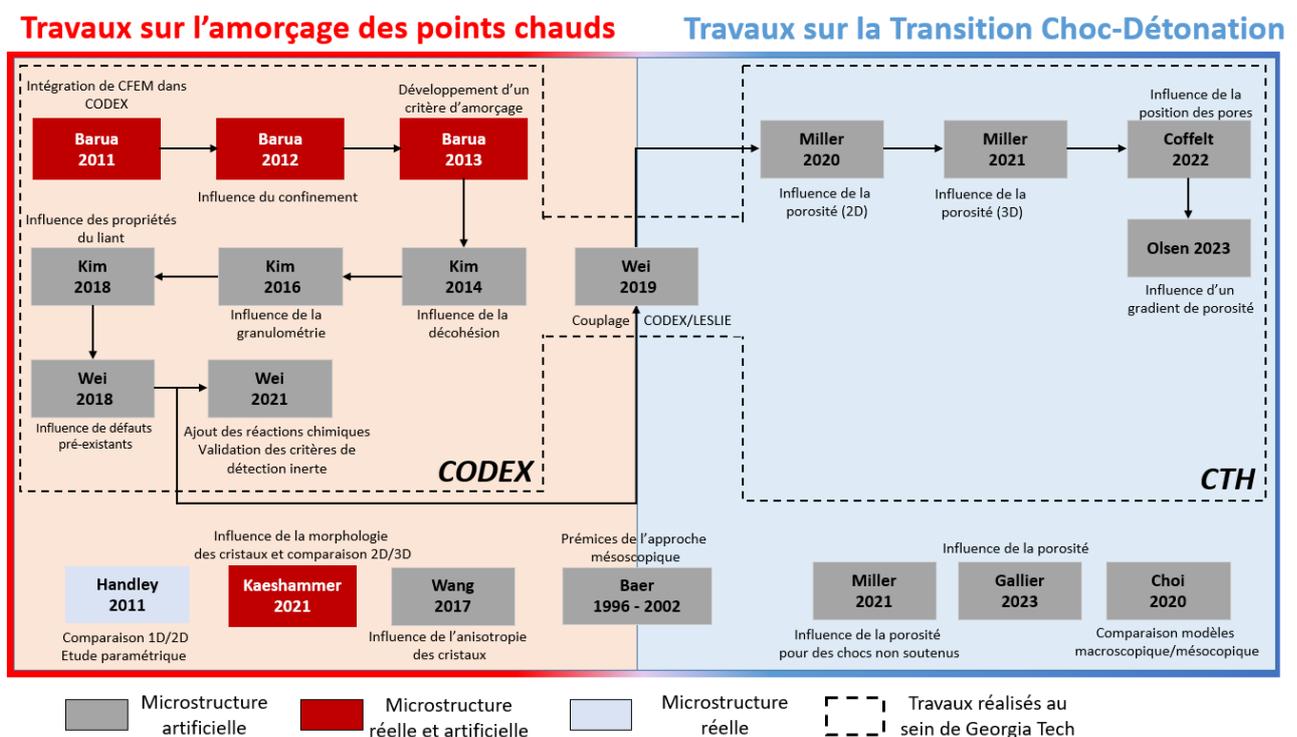


FIGURE 4.27 – Schéma récapitulatif de l'état de l'art réalisé pour l'approche mésoscopique.

Positionnement de la thèse

Les efforts de la communauté scientifique pour modéliser la TCD peuvent être décomposés selon quatre échelles de temps et d'espace^a :

- l'échelle atomique, consistant à modéliser l'interaction des atomes et des molécules entre elles. Elle est généralement réservée aux phénomènes dont les dimensions temporelles et spatiales sont de l'ordre de la nanoseconde (ns) et du nanomètre (nm). Les études réalisées à l'échelle atomique devrait permettre de déterminer des données difficilement accessibles expérimentalement, comme les vitesses de réaction [126], ou de les compléter dans des conditions encore inaccessibles avec les dispositifs actuels [127] ;
- l'échelle microscopique, dont les dimensions spatiales sont de l'ordre du micromètre (μm). Elle est principalement dédiée à l'étude de petites populations de points chauds. Les études réalisées se focalisent principalement sur l'effondrement de pores ;
- l'échelle mésoscopique, visant à modéliser l'interaction d'une onde de choc avec la microstructure de l'explosif. Les dimensions spatiales considérées vont du micromètre ($\sim \mu\text{m}$) à la dizaine de millimètres ($\sim \text{mm}$). Cette échelle permet l'étude de populations importantes de points chauds et de leurs interactions. Les mécanismes de formation des points chauds étudiés sont variés et la transition du choc en détonation peut être observée ;
- l'échelle macroscopique, où l'explosif est représenté par un matériau homogène. Les points chauds ne sont pas modélisés explicitement mais sont retranscrits par le biais de paramètres numériques dans les modèles réactifs employés. Les dimensions considérées sont supérieures au millimètre ($> \text{mm}$). C'est une échelle adaptée à la simulation numérique de géométries importantes.

Des efforts sont également menés afin de coupler les différentes échelles entre elles. À titre d'exemple, dans le cadre des travaux de Jackson *et al.* [125], les travaux réalisés à l'échelle mésoscopique emploient une cinétique composée d'un terme issu d'études d'implosion de pores réalisées à l'échelle microscopique. De même, l'approche mésoscopique a vocation à alimenter les modèles macroscopiques de TCD, plus adaptés à la simulation de géométries importantes et de systèmes.

Cette thèse s'inscrit dans la lignée des travaux réalisés à l'échelle mésoscopique. L'objectif à long terme de ces travaux est de disposer d'un modèle réactif mésoscopique prédictif de la TCD des explosifs afin que l'élaboration des modèles de TCD macroscopiques puisse être réalisée en

a. À l'heure actuelle, il n'y a pas encore consensus sur la dénomination exacte associée à ces différentes échelles et il est courant que des études réalisées à l'échelle microscopique soient qualifiées de mésoscopiques.

se basant sur une approche numérique. Cela s'accompagne également d'une volonté de mieux comprendre les phénomènes physiques se déroulant à l'échelle de la microstructure pour permettre le développement de modèles macroscopiques plus performants.

Dans le chapitre précédent (chapitre 4), nous avons vu que les travaux réalisés à l'échelle mésoscopique peuvent se décomposer en deux catégories : les travaux portant sur la détermination des mécanismes de formation des points chauds et ceux portant sur la TCD. Dans ces derniers, les modèles réactifs employés sont généralement issus de modèles macroscopiques avec une dépendance en pression. La formation des points chauds est induite par ces modèles lors de la simulation. De plus, la *quasi* totalité de ces études se focalisent sur le mécanisme d'effondrement de pores.

Dans le cadre de cette thèse, un modèle réactif a été développé à partir des observations expérimentales réalisées par Johnson *et al.* [9, 10] qui suggèrent que les cristaux énergétiques sous choc brûlent selon un mécanisme de régression de surface (chapitre 2). Ainsi, nous ferons l'hypothèse que les réactions chimiques se développent sur toute la surface des cristaux énergétiques suite au passage de l'onde de choc. Une fois ces points chauds amorcés, la propagation des réactions chimiques est réalisée *via* un front de déflagration.

Ces travaux de thèse ont pour objectif d'étudier la pertinence de ce modèle réactif.

Pour réaliser des simulations mésoscopiques avec ce modèle réactif, trois données sont nécessaires :

- la granulométrie de la composition d'étude qui est une donnée d'entrée des simulations réalisées. Ce besoin sera détaillé dans le chapitre 6 ;
- la vitesse de déflagration des cristaux énergétiques qui est une donnée d'entrée du modèle réactif. Ce point sera abordé dans le chapitre 7 ;
- le Pop-Plot de la composition étudiée afin de valider les résultats obtenus. Cette notion a fait l'objet d'une discussion dans le chapitre 3.

Pour cette thèse, le choix du matériau d'étude s'est porté sur le HMX comprimé. Le HMX étant l'un des cristaux énergétiques les plus étudiés [11], les trois données nécessaires à notre étude sont disponibles dans la littérature (voir figure 5.1).

La configuration étudiée dans les simulations numériques est celle du test du coin, introduite en section 3.1. Comme nous avons pu le voir dans le chapitre 3, les enjeux liés à l'hypothèse de la courbe unique de transition sont importants. À l'heure actuelle, relativement peu d'études ont été réalisées sur ce sujet. Nous apporterons donc une attention particulière à la vérification de cette hypothèse.

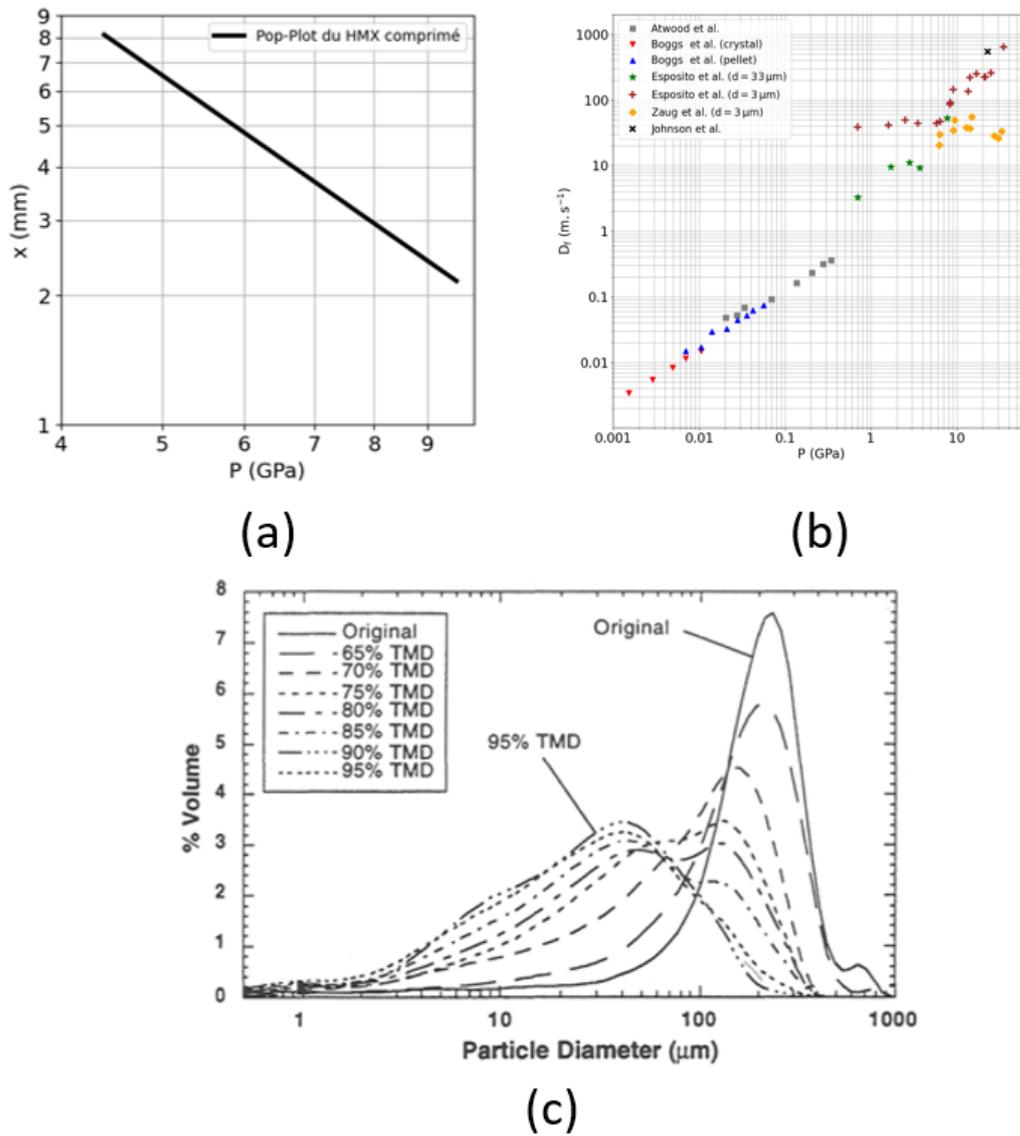


FIGURE 5.1 – (a) Pop-Plot du HMX comprimé issu des travaux de Gibbs et Popolato [128]; (b) vitesses de déflagration du HMX disponibles dans la littérature; (c) granulométrie du HMX comprimé issue des travaux de Burnside *et al.* [129].

Deuxième partie

Mise en place des simulations
mésoscopiques

Génération de la microstructure

Sommaire

6.1	Modélisation de la microstructure de l'explosif	108
6.1.1	Tesselations de Voronoï et de Laguerre	108
6.1.2	Algorithmes de génération	109
6.2	Caractérisation de la microstructure	113
6.3	Maillage	114
6.4	Mesures de la granulométrie du HMX comprimé	115

La première étape à la réalisation de simulations mésoscopiques de TCD consiste à modéliser la microstructure de l'explosif. Dans le cadre de ce travail de thèse, nous avons choisi d'employer des microstructures artificielles. Cela nous permettra notamment de disposer d'un nombre important de microstructures afin d'évaluer la stochasticité engendrée par la variabilité de la microstructure. Une attention particulière a été portée sur l'automatisation des simulations numériques, de la génération de la microstructure au post-traitement des simulations afin de permettre cette évaluation.

Une chaîne de calcul mésoscopique, illustrée en figure 6.1, a été développée. Elle se décompose en trois axes :

1. L'axe Microstructure. Il regroupe aussi bien l'étape de génération de la microstructure que la caractérisation de ses propriétés morphologiques. Toutes les microstructures générées sont stockées afin de constituer une base de données de microstructures.
2. L'axe Simulation. Il regroupe le maillage de la microstructure, ainsi que les simulations numériques avec le code de calcul OURANOS [130].
3. L'axe Post-Traitement. Il permet de préparer l'analyse des résultats numériques.

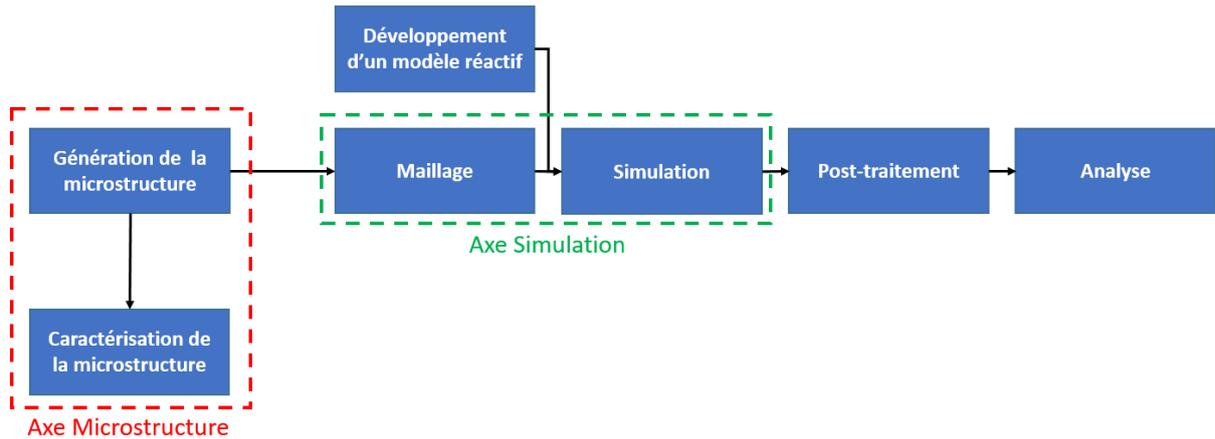


FIGURE 6.1 – Illustration de la chaîne de calcul mésoscopique développée au cours de la thèse.

Dans le cadre de ces simulations, un modèle réactif de régression de surface a également été implémenté dans le code de calcul OURANOS. Cette implémentation, réalisée par le CEA Gramat, est détaillée en section 7.4.

6.1 Modélisation de la microstructure de l'explosif

Plusieurs méthodes peuvent être employées pour modéliser la microstructure des explosifs. Dans la littérature, les méthodes utilisées pour générer les microstructures sont généralement basées sur des tessellations de Voronoï. Les tableaux B.1, B.2 et B.3 de l'annexe B présentent un récapitulatif des microstructures artificielles rencontrées dans les études d'amorçage par choc et de TCD à l'échelle mésoscopique. Dans le cadre de cette thèse, les microstructures seront générées à partir de tessellations de Voronoï et de Laguerre.

6.1.1 Tessellations de Voronoï et de Laguerre

Une tessellation de Voronoï consiste à réaliser la division d'un domaine $D \in \mathbb{R}^k$ en plusieurs régions à partir d'un ensemble de points $G = G_i, i \in \mathbb{N}$, appelés germes. Chaque germe G_i définit une "cellule de Voronoï", notée C_i , qui correspond à l'ensemble des points les plus proches de ce germe [131]. Mathématiquement, cela se traduit par :

$$C_i = \{\forall x \in D, (i, j) \in \mathbb{N}^2 : i \neq j \Rightarrow d(x, G_i) < d(x, G_j)\} \quad (6.1)$$

où d est la distance euclidienne. Les cellules obtenues sont convexes avec des surfaces planes. Lors de la génération d'une microstructure, les germes sont implantés aléatoirement dans le domaine D . Chaque cellule de Voronoï correspond à un grain de la microstructure. Les propriétés morphologiques d'une microstructure générée par une tessellation de Voronoï dépendent du nombre de germes et de la loi de probabilité utilisée pour l'implantation des germes.

Une tessellation de Laguerre est similaire à une tessellation de Voronoï, mais chaque germe G_i se voit affecté un poids $w_i \in \mathbb{R}$. La définition d'une cellule de Laguerre est alors donnée par :

$$C_i = \{\forall x \in D, (i, j) \in \mathbb{N}^2 : i \neq j \Rightarrow d_L(x, G_i) < d_L(x, G_j)\} \quad (6.2)$$

avec $d_L(x, G_i)^2 = d(x, G_i)^2 - w_i$.

Une tessellation de Voronoï est donc un cas particulier de tessellation de Laguerre, avec des germes de poids tous égaux [132]. Un partitionnement de Laguerre permet d'obtenir des géométries de grains plus complexes et variées qu'avec un partitionnement de Voronoï. Les cellules restent toutefois convexes.

6.1.2 Algorithmes de génération

Lors d'une simulation numérique, le code de calcul OURANOS nécessite de disposer d'un maillage comme donnée d'entrée. Dans le cas de simulations eulériennes, ce maillage est projeté sur une grille cartésienne et ne sert qu'à définir la géométrie du problème. Afin de réaliser les simulations mésoscopiques de TCD, un algorithme est employé pour générer la microstructure. À l'issue de cette génération, les contours des grains sont extraits et stockés. Un maillage est ensuite réalisé avec le logiciel GMSH [133] à partir des contours de chaque grains.

Dans le cadre de ce travail, plusieurs méthodes de génération de microstructures ont été considérées. Les deux premières méthodes développées ont été réalisées *via* un script Python. Cependant, ces méthodes étaient peu performantes et ont rapidement atteint leurs limites du fait des dimensions des microstructures considérées (70 mm × 22 mm pour modéliser un coin) et de la granulométrie des explosifs d'intérêt (de l'ordre de 40 μm). Elles ont alors été remplacée par le logiciel de génération de polycristaux *Neper* [131]. Cette sous-section aborde les différentes méthodes développées dans le cadre de cette thèse afin de générer les microstructures employées dans les simulations mésoscopiques.

Algorithme de germination-croissance

Le premier algorithme employé pour générer une microstructure est réalisé en deux étapes. Tout d'abord, une étape de germination est réalisée, consistant à placer un certain nombre de germes aléatoirement dans une matrice représentant le domaine d'étude. À chaque germe est attribué un identifiant. Une étape de croissance des germes est ensuite réalisée jusqu'à ce que les différents grains entrent en contact. Une illustration du fonctionnement de cet algorithme est présenté en figure 6.2.

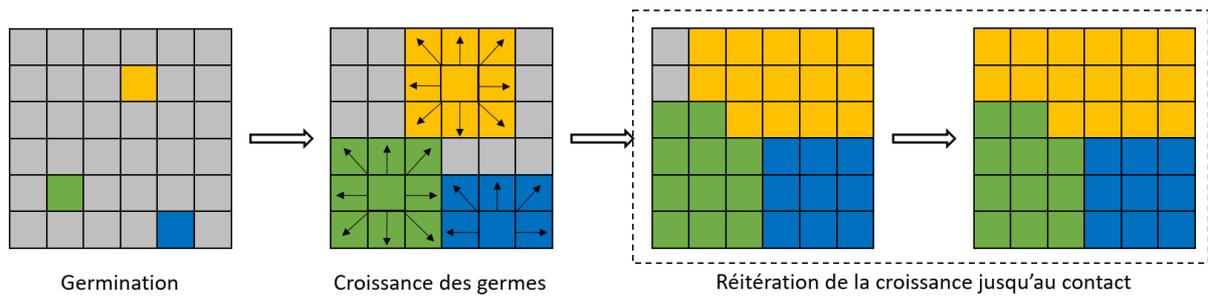


FIGURE 6.2 – Illustration de l'algorithme de germination-croissance employé pour générer des microstructures de HMX comprimé.

À l'issue de ces étapes, on dispose d'une matrice dont les cases comportent des identifiants numériques. Un grain correspond à l'ensemble des cases ayant le même identifiant. Afin d'extraire les contours des grains et de permettre le maillage de la microstructure, un algorithme *Marching square*^a est employé.

Cette première méthode présente cependant plusieurs inconvénients. Tout d'abord, elle ne permet aucun contrôle de la granulométrie de la microstructure. De plus, l'algorithme d'extraction des contours ne permettait pas une extraction parfaite des grains, et des porosités apparaissaient au niveau des jonctions entre les grains, comme illustré en figure 6.3 et 6.4.

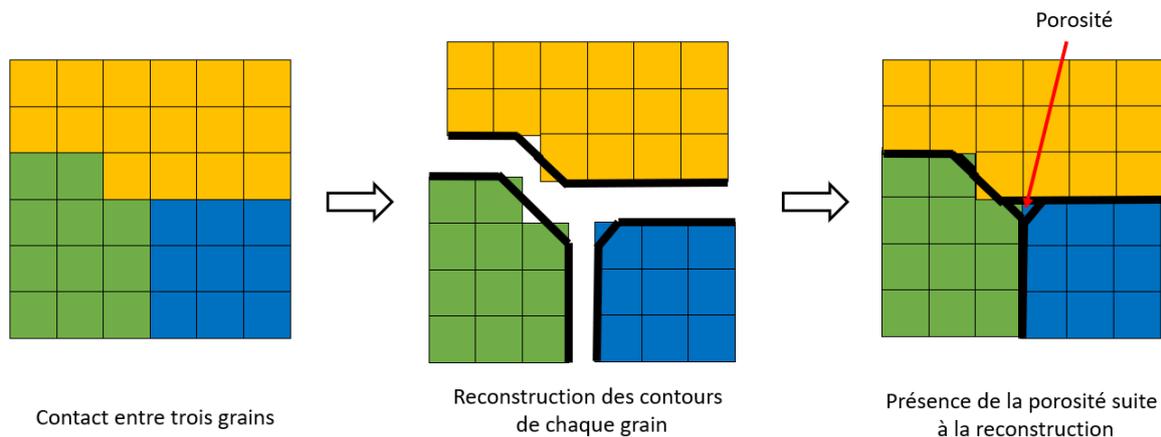


FIGURE 6.3 – Schéma illustrant la cause des porosités induites par l'extraction des contours de la microstructure lors de la génération de la microstructure avec l'algorithme de germination-croissance.

a. Les algorithmes *Marching square* sont les versions bidimensionnelles des algorithmes de type *Marching Cubes* [134]

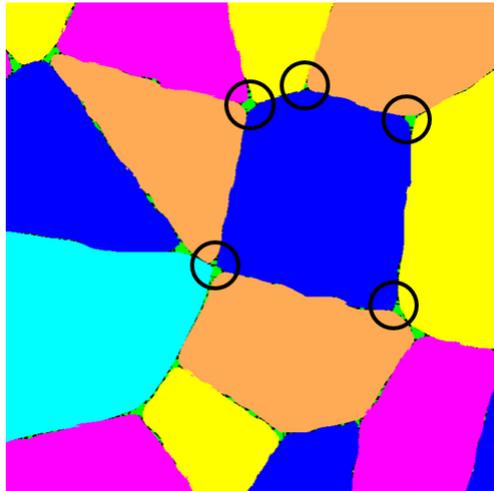


FIGURE 6.4 – Illustration des porosités induites par l'extraction des contours de la microstructure lors de la génération de la microstructure avec l'algorithme de germination-croissance.

Algorithme de génération par calcul de distance

Afin de permettre un meilleur contrôle de la taille des grains, un second algorithme de génération a été implémenté. Son fonctionnement est le même que celui présenté ci-dessus, mis à part pour l'étape de croissance qui a été modifiée. Désormais, une fois la germination achevée, à chaque case de la matrice est calculée la distance de la case aux germes de la microstructure. Un identifiant lui est ensuite attribué, identique à celui du germe le plus proche. Une illustration de cet algorithme est présentée en figure 6.5. Pour mieux contrôler la granulométrie de la microstructure, les germes peuvent être pondérés afin de leur donner plus de poids lors du calcul des distances.

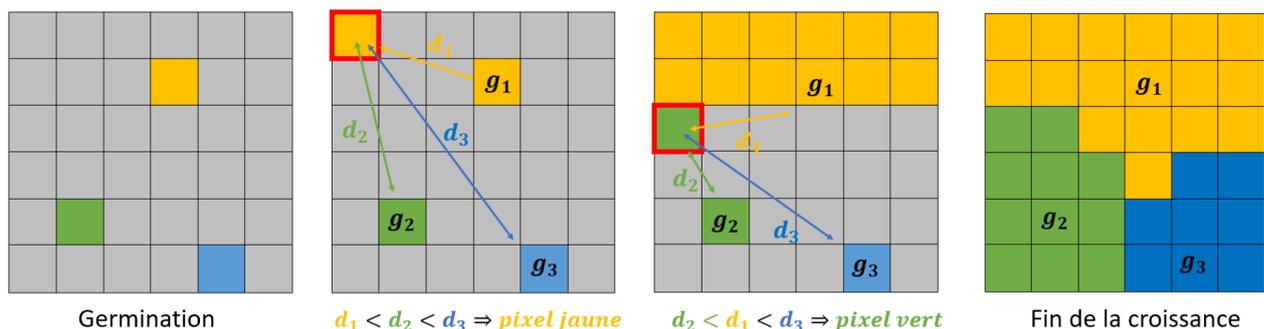


FIGURE 6.5 – Illustration de l'algorithme de génération de microstructure basé sur le calcul de distance.

Le principal inconvénient de cet algorithme est le temps de calcul des distances qui augmente avec le nombre de germes et qui devient rapidement déraisonnable. L'extraction des contours, réalisée avec le même algorithme que dans la méthode de germination-croissance, engendrait également des porosités dans les microstructures.

Passage au logiciel *Neper*

Désormais, les tessellations sont réalisées avec le logiciel de génération de polycristaux *Neper* [131]. Celui-ci emploie un algorithme de génération de microstructure de complexité $\mathcal{O}(n \log n)$, où n représente le nombre de grains. Ainsi, pour générer une microstructure avec 45000 grains, moins d'une minute est nécessaire au calcul tandis que plusieurs heures étaient requises avec les algorithmes évoqués ci-dessus. Le logiciel *Neper* inclut des fonctionnalités permettant le contrôle des propriétés morphologiques de la microstructure. Cela permet également de résoudre les problèmes liés à la présence de porosité aux jonctions des grains. Les contours de grains sont directement obtenus *via Neper*, et il n'est donc plus nécessaire de recourir à un algorithme d'extraction des contours.

Plus de 800 microstructures ont été générées avec le logiciel, et une centaine d'entre elles a été employée pour réaliser des simulations numériques. La figure 6.6 illustre l'une de ces microstructures.

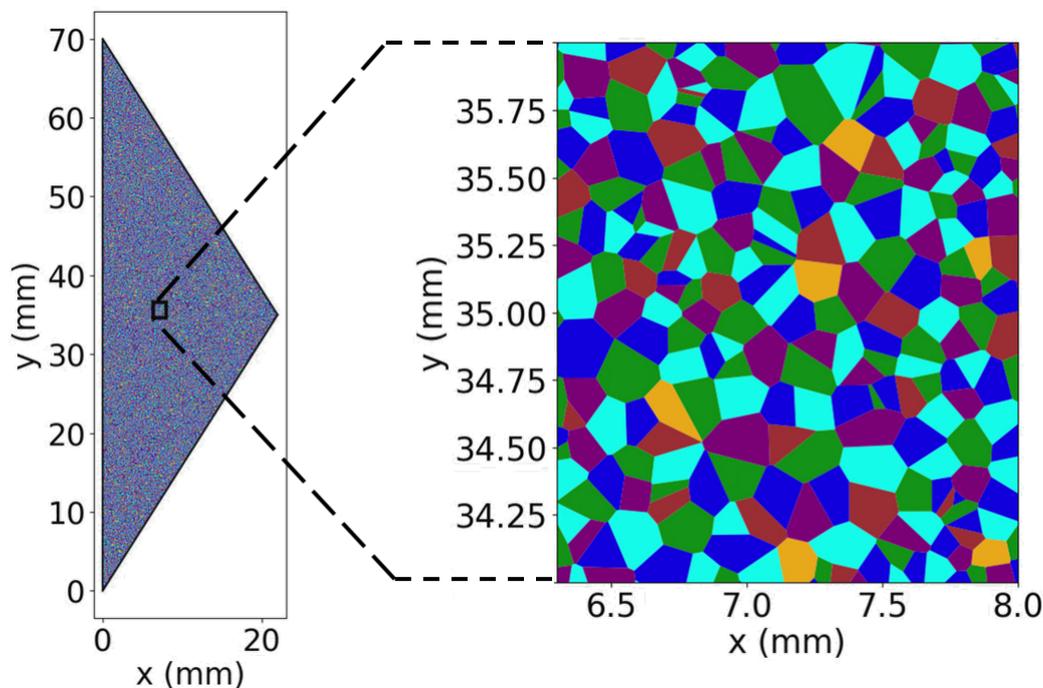


FIGURE 6.6 – Illustration d'une microstructure générée avec *Neper* [131]. .

Ajout du liant

Bien que cette thèse se focalise sur le HMX comprimé, elle s'inscrit dans une approche plus générale portant sur l'étude de la TCD des explosifs hétérogènes. Une fonctionnalité a donc été implémentée dans la chaîne de calcul afin d'intégrer le liant aux microstructures générées *via Neper*. Ainsi, à l'issue de la génération des microstructures, une homothétie de rapport $\lambda \in]0, 1[$ est réalisée pour chaque cristal énergétique en prenant le centre de masse du cristal comme centre de l'homothétie. A la fin de cette étape, on dispose d'une microstructure ayant un taux

de chargement $f_v = \lambda^2$.

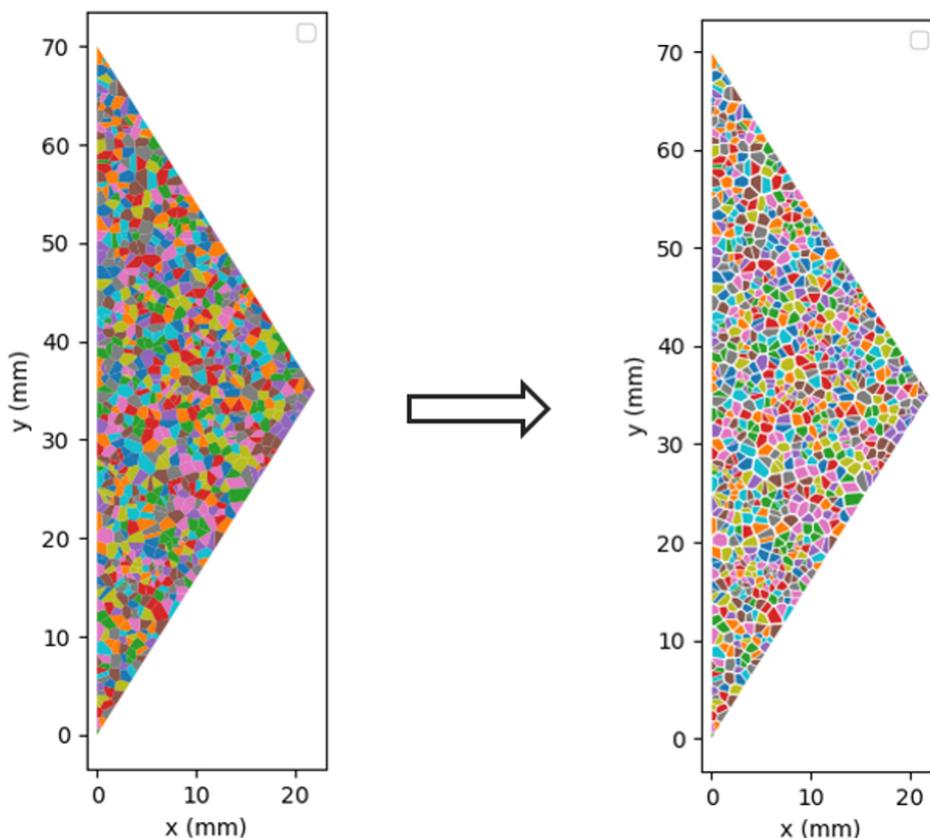


FIGURE 6.7 – Illustration de l’algorithme permettant d’obtenir une microstructure avec un taux de chargement $f_v = 0.9$ (droite) à partir d’une microstructure de HMX comprimé générée avec le logiciel *Neper* (gauche).

6.2 Caractérisation de la microstructure

Par nature, la microstructure des explosifs condensés est stochastique. Il est donc primordial de caractériser les microstructures employées dans les simulations afin de pouvoir déterminer les propriétés microstructurales qui influencent la TCD. La caractérisation des microstructures générées est également un moyen d’estimer la représentativité des microstructures numériques par rapport à celles des explosifs réels. Pour chaque cristal de la microstructure, les propriétés morphologiques extraites sont les suivantes :

- la surface S ,
- le périmètre p ,
- le diamètre équivalent d_{eq} , qui correspond au diamètre d’un disque de surface S ,
- le facteur de forme $\frac{S}{V}$, qui correspond en 2D au quotient du périmètre par la surface $\frac{p}{S}$.

À partir des informations de chaque cristal, la distribution de ces indicateurs dans la microstructure est ensuite reconstruite. Les valeurs moyennes, les écart-types, ainsi que les quartiles associés à ces indicateurs sont également calculés. Dans la suite de ce manuscrit, la valeur moyenne d’une grandeur g sera notée \bar{g} .

La figure 6.8 illustre les propriétés morphologiques moyennes des 800 microstructures mentionnées ci-dessus en fonction de leur nombre de germes. Chaque point correspond à une microstructure.

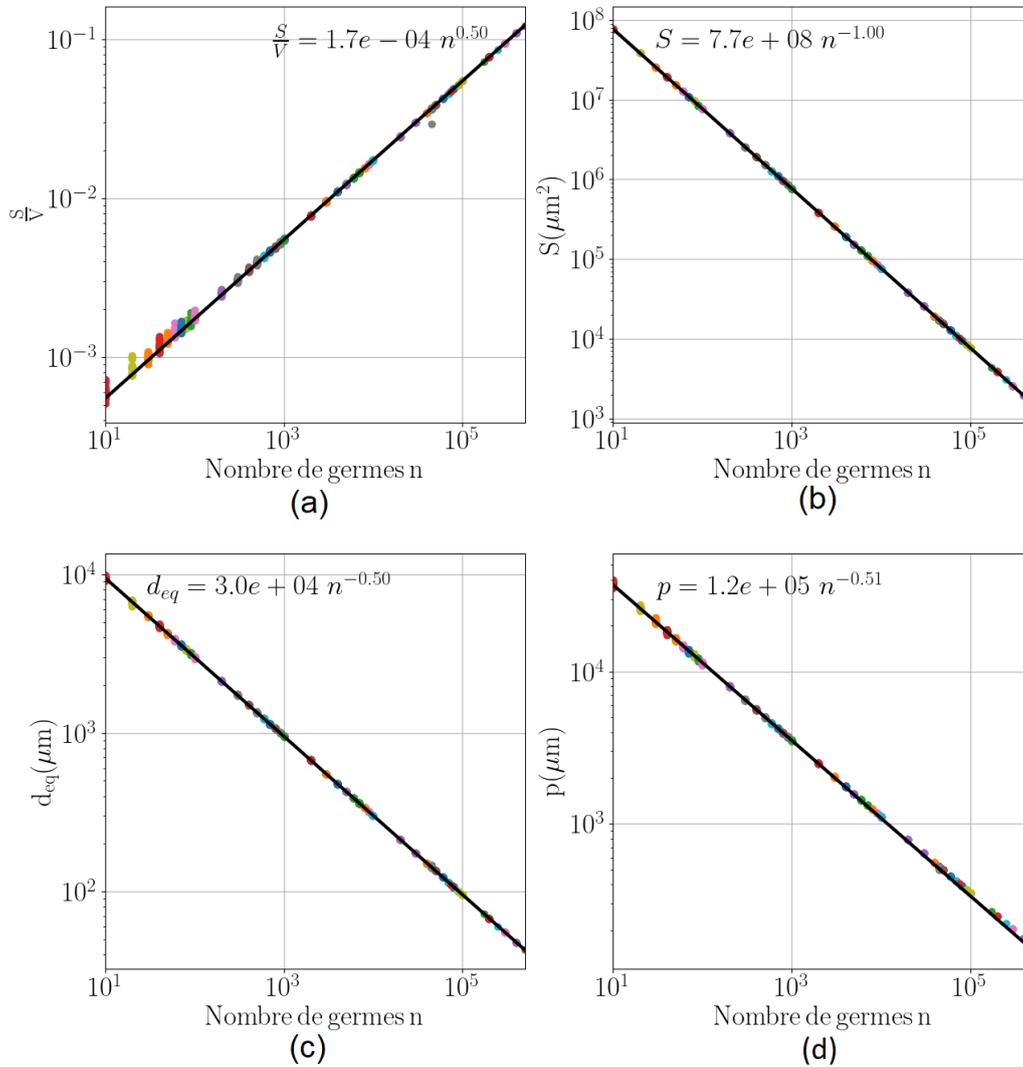


FIGURE 6.8 – Propriétés morphologiques des microstructures générées dans le cadre de la thèse : (a) facteur de forme moyen ; (b) surface moyenne ; (c) diamètre équivalent moyen ; (d) périmètre moyen.

6.3 Maillage

Pour réaliser des simulations numériques avec le code de calcul OURANOS, la géométrie du problème doit être importée sous la forme d'un maillage.

Dans le cadre de cette thèse, le logiciel de maillage par éléments finis GMSH [133] est utilisé pour réaliser le maillage. L'algorithme *MeshAdapt* est employé et le maillage obtenu est non structuré avec des mailles triangulaires. Un script Python a été réalisé afin que le maillage des

microstructures soit réalisé automatiquement par le logiciel GMSH à partir des contours des grains. Il est généré au format *.unv*, compatible avec OURANOS.

À titre d'exemple, le maillage d'une microstructure de 45000 grains requiert environ 300000 mailles triangulaires.

6.4 Mesures de la granulométrie du HMX comprimé

Lors de la fabrication de poudres comprimées, les cristaux énergétiques sont généralement compactés entre eux pour former des pastilles. Au cours de ce processus, les cristaux se fissurent, ce qui réduit leur taille. Par conséquent, pour que les microstructures employées dans nos simulations soient représentatives de notre matériau d'étude, il est nécessaire que celles-ci tiennent compte de cet endommagement.

Dans la littérature, des mesures de granulométrie du HMX comprimé sont disponibles. Dans les travaux de Burnside *et al.* [129], des échantillons de HMX comprimés à différents taux de chargement sont caractérisés et comparés à la granulométrie des cristaux avant le processus de compaction. Pour cela, les cristaux sont compactés afin de former des pastilles qui sont ensuite désagrégées pour la mesure. Deux groupes d'étude sont alors formés. Le premier groupe est directement analysé par diffraction lumineuse. Le second groupe, quant à lui, est passé sur un tamis vibrant puis analysé avec le même dispositif que le premier groupe. Le passage sur tamis vibrant est réalisé afin de détecter les fissures qui seraient trop fines pour être repérées uniquement par le dispositif de diffraction lumineuse. Avec cette démarche, les auteurs mesurent que les cristaux de HMX passent d'un diamètre moyen d'environ 193 μm à 131 μm lorsqu'ils sont compactés à 95% de la TMD. Avec l'utilisation du tamis vibrant, le diamètre moyen obtenu est de l'ordre de 40 μm . Ces travaux montrent l'importance de la compaction sur la granulométrie des compositions. Pour être représentatives des compositions d'étude, la granulométrie des microstructures employées dans les simulations mésoscopiques doivent donc correspondre à celles obtenues après compaction. Les figures 6.9.a et 6.9.b illustrent le résultat des mesures réalisées par Burnside *et al.*[129].

Dans une étude plus récente, Bouchet [135] a étudié l'influence de la compaction sur la granulométrie de différentes classes de cristaux de HMX. Ainsi, des grains appartenant à trois classes de HMX avec des diamètres moyens compris entre 175 μm et 1 μm ont été compactés en pastilles à différents taux de chargement. Elles sont ensuite désagrégées *via* un bain d'ultrasons et analysées par diffraction laser. Les résultats obtenus ont montré que la granulométrie finale des échantillons compactés à 90% présentait un diamètre moyen de l'ordre 1 μm pour chacune des classes considérées. Ces valeurs sont bien inférieures à celles obtenues par Burnside *et al.* [129]. La figure 6.9.c illustre le résultat des mesures réalisées par Bouchet.

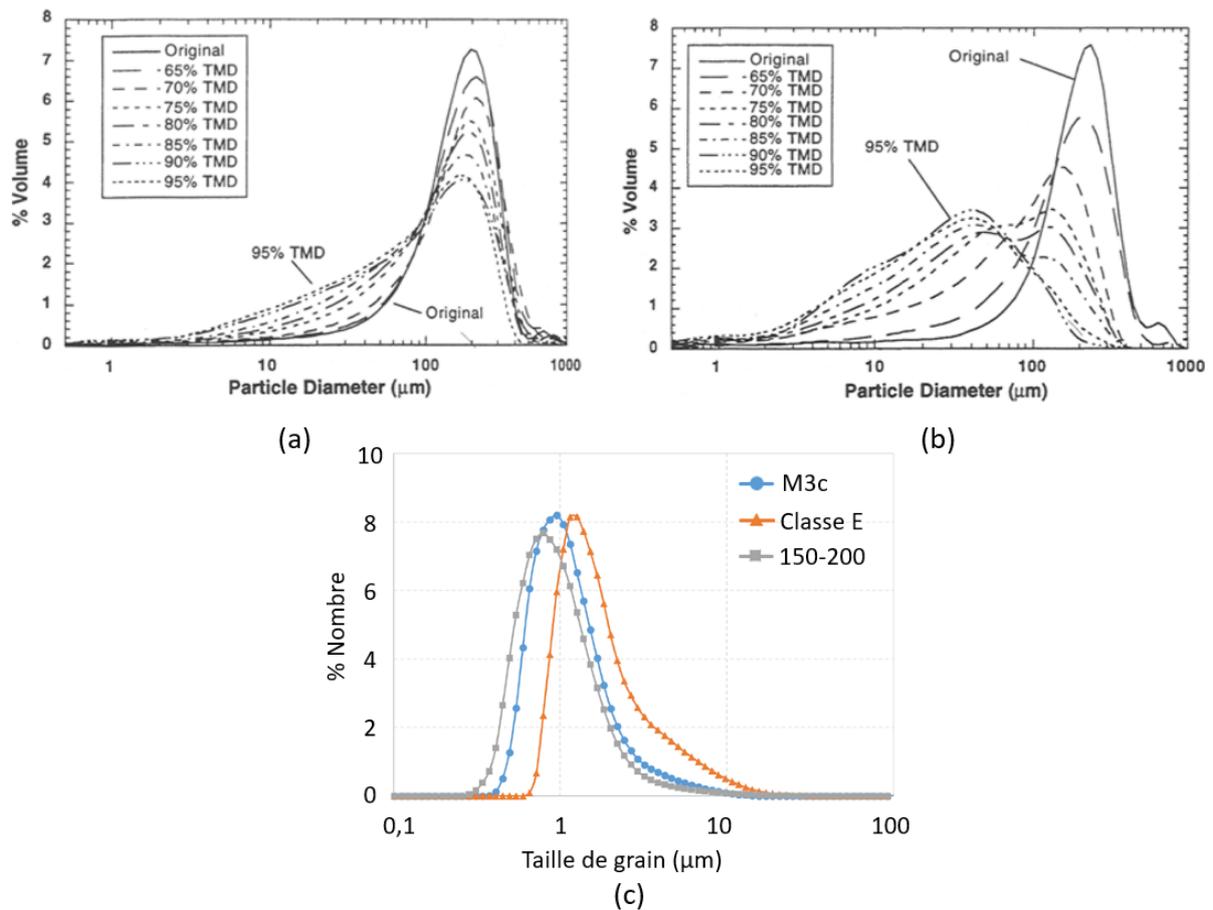


FIGURE 6.9 – Granulométries d'échantillons de HMX comprimé à plusieurs taux de chargement mesurées par Burnside *et al.* [129], sans utilisation d'un tamis vibrant (a) et avec utilisation d'un tamis vibrant (b), et par Bouchet [135] (c).

Pour notre étude, nous nous focaliserons sur des microstructures avec un diamètre moyen de l'ordre de 40 μm. Ce choix a été réalisé afin d'éviter des coût de calcul trop important pour les simulations numériques. En effet, la résolution nécessaire pour le maillage d'une microstructure avec des cristaux dont la taille est de l'ordre du micron engendrerait des temps de calculs prohibitifs étant donnée la taille du domaine considéré. À titre d'exemple, le temps de calcul nécessaire pour une simulation avec une microstructure de 162 μm de diamètre moyen est d'une journée sur 640 processeurs, soit 15000 heures CPU. Pour une microstructure de 48.8 μm de diamètre moyen, le temps de calcul nécessaire à une simulation est de l'ordre d'une semaine sur 2048 processeurs, soit 340000 heures CPU.

Modélisation de la TCD

Sommaire

7.1	Configuration des simulations	118
7.2	Équations d'état	118
7.3	Modèle réactif employé	120
7.4	Implémentation du modèle réactif de régression de surface	122
7.4.1	Algorithme basé sur la méthode de Youngs	122
7.4.2	Algorithme basé sur la méthode de propagation de front d'onde	126

Une fois les microstructures générées et maillées, les simulations numériques sont réalisées avec le code de calcul d'hydrodynamique rapide OURANOS, développé par le CEA. Il est basé sur la méthode des éléments finis, ainsi que sur celle des différences finies. Dans le cadre de cette thèse, les simulations seront effectuées avec un solveur eulérien et un schéma MYR. Les équations résolues par le solveur d'OURANOS sont les équations d'Euler :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho u) = 0 \quad (7.1)$$

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho u \otimes u) + \operatorname{grad}(P) = 0 \quad (7.2)$$

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho E u + P u) = 0 \quad (7.3)$$

$$\frac{\partial \lambda}{\partial t} = R(P, T, \lambda) \quad (7.4)$$

où ρ est la masse volumique, u la vitesse, P la pression, E l'énergie totale, T la température, λ l'avancement de la réaction et $R(P, T, \lambda)$ correspond à la cinétique chimique de l'explosif.

Une loi de mélange est également nécessaire entre les réactifs et les produits de détonation, basée sur une équilibre (v, T) , (H, P) , ou (P, v) .

7.1 Configuration des simulations

Afin d'étudier la TCD du HMX comprimé, nous avons choisi de modéliser la géométrie expérimentale du test du coin. Cela nous permettra d'étudier si l'échantillon employé dans les configurations expérimentales est suffisamment grand pour être représentatif de la TCD.

Une illustration de cette configuration est présentée en figure 7.1. Dans les simulations, un impacteur en aluminium est employé. Ses dimensions, de 70 mm × 25 mm, ont été choisies afin de garantir un choc soutenu dans l'explosif.

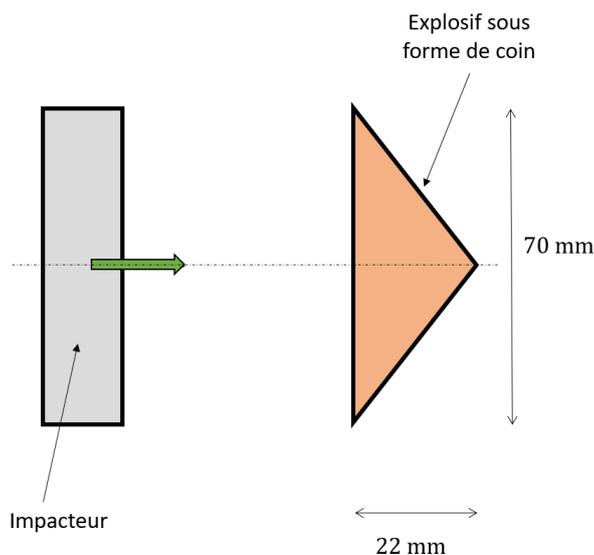


FIGURE 7.1 – Schéma de principe du *test du coin*.

7.2 Équations d'état

Les phases solides, à savoir l'impacteur et les cristaux de HMX, sont modélisés avec une équation d'état de Cochran-Chan [136]. Les produits de détonation du HMX sont quant à eux modélisés par une équation d'état Jones-Wilkins-Lee (JWL) [137]. Les équations d'état JWL et de Cochran-Chan sont basés sur un formalisme de type Mie-Gruneisen :

$$e - e_{ref} = \frac{v}{\Gamma}(P - P_{ref}) \quad (7.5)$$

$$e - e_{ref} = c_v(T - T_{ref}) \quad (7.6)$$

où e correspond à l'énergie interne, v au volume spécifique, T à la température, c_v à la capacité calorifique à volume constant, P à la pression, et Γ au coefficient de Gruneisen.

Pour l'équation d'état JWL, les grandeurs de référence sont les suivantes :

$$P_{ref} = Ae^{-R_1 \frac{v}{v_0}} + Be^{-R_2 \frac{v}{v_0}} + \frac{C}{\left(\frac{v}{v_0}\right)^{\omega+1}} \quad (7.7)$$

$$T_{ref} = T_{CJ} \left(\frac{v_{CJ}}{v}\right)^\omega \quad (7.8)$$

$$de_{ref} = -P_{ref} dv \quad (7.9)$$

où A , B , C , R_1 , R_2 et ω sont des paramètres à déterminer et les grandeurs indicées CJ correspondent aux grandeurs associées à l'état de Chapman-Jouguet du matériau. Les grandeurs indicées 0 correspondent aux grandeurs prises à l'état standard.

Pour l'équation d'état de Cochran-Chan, les grandeurs de référence sont les suivantes :

$$P_{ref} = A_1 \left(\frac{v}{v_0}\right)^{-E_1} - A_2 \left(\frac{v}{v_0}\right)^{-E_2} \quad (7.10)$$

$$e_{ref} = \frac{A_1 v_0}{1 - E_1} \left[\left(\frac{v}{v_0}\right)^{1-E_1} - 1 \right] + \frac{A_2 v_0}{1 - E_2} \left[\left(\frac{v}{v_0}\right)^{1-E_2} - 1 \right] - c_v T + e_0 \quad (7.11)$$

où A_1 , A_2 , E_1 et E_2 sont des paramètres de l'équation d'état. Les grandeurs indicées 0 correspondent aux grandeurs définies à l'état standard.

Les coefficients employés dans les équations d'état ont été déterminés avec le code de thermo-chimie SIAME [138] en spécifiant les matériaux utilisés dans le logiciel. Ils sont regroupés dans les tableaux 7.1 et 7.2.

Paramètres	A_1 (GPa)	A_2 (GPa)	E_1	E_2
Aluminium	$2.011482 \cdot 10^6$	$2.017149 \cdot 10^6$	1.934051	1.934047
HMX	4.35	4.91	4.80	0.51

TABLE 7.1 – Tableau récapitulatif des paramètres employés dans les équations d'état de Cochran-Chan.

Paramètres	A (GPa)	B (GPa)	C (GPa)	R_1	R_2	ω
Produits de détonation du HMX	$1.19 \cdot 10^3$	36.86	1.68	5.31	1.63	0.33

TABLE 7.2 – Tableau récapitulatif des paramètres employés dans l'équation d'état JWL.

Les simulations sont réalisées avec un équilibre (P, v) dans les mailles mixtes.

7.3 Modèle réactif employé

Une des difficultés liées à la modélisation mésoscopique de la TCD réside dans le choix d'une cinétique chimique pour les différentes phases constituant l'explosif. En effet, les vitesses de réaction sous choc et en régime de détonation du liant et des cristaux énergétiques sont encore globalement mal connues [11].

Dans ce modèle réactif, il est supposé que les réactions chimiques s'amorcent sur toute la surface des grains énergétiques et qu'elles se propagent selon un régime de combustion en surface. Pour un grain dont la surface régresse du fait de la propagation d'un front de déflagration, l'évolution de sa fraction massique au cours du temps est donnée par :

$$\frac{d\lambda}{dt} = \frac{S(t)}{V_0} D_f \quad (7.12)$$

avec λ la fraction massique de HMX réagi dans le grain, S la surface du grain en train de brûler à l'instant t , V_0 le volume initial du grain, et D_f la vitesse du front de déflagration.

Une illustration de ce modèle réactif est présentée en figure 7.2.

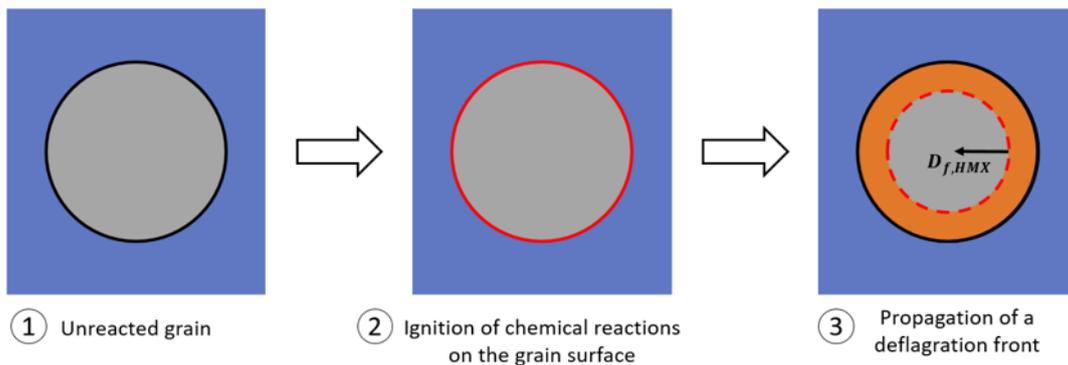


FIGURE 7.2 – Illustration du modèle réactif de régression de surface appliqué à un cristal idéalisé amorcé sur toute sa surface.

On retrouve ici une approche similaire au modèle macroscopique de TCD NGDK [1] qui suppose que l'amorçage des points chauds a lieu à la surface des cristaux énergétiques et modélise la vitesse de déflagration de ces cristaux par une relation de type « AP^n ». Dans les simulations numériques mésoscopiques, le volume des grains, leur fraction volumique, et la surface des grains sont directement pris en compte par la modélisation de la microstructure. La vitesse de déflagration est une donnée d'entrée pour ce modèle réactif.

Dans le code de calcul OURANOS, ce modèle réactif n'est pas nativement présent. Son implémentation, réalisée au sein du laboratoire d'accueil, est l'objet de la section 7.4.

Des mesures de vitesse de déflagration de cristaux de HMX sont disponibles dans la littérature [16]. Cependant, ces mesures n'ont été réalisées que pour des pressions inférieures à la dizaine de MPa : au-delà, les cristaux se fracturent et il n'est plus possible de mesurer la vitesse

de déflagration des cristaux [16]. Pour pouvoir atteindre des pressions plus élevées, les cristaux sont broyés en poudre, et sont mis sous pression dans une bombe calorimétrique [16] ou dans une enclume en diamant [17, 139]. Il est ainsi possible de mesurer des vitesses de déflagration plus élevées, allant jusqu'à plusieurs dizaines de GPa pour des enclumes en diamant [17, 139]. Dans les travaux de Boggs [16], les vitesses de déflagration obtenues avec de la poudre de HMX et avec les cristaux purs sont similaires lorsqu'elles sont mesurées pour les mêmes pressions. Cependant, les mesures de Zaug et Esposito [17, 139], effectuées en enclume en diamant, montrent une dépendance entre la granulométrie de la poudre et les vitesses de déflagration. Ces mesures retranscrivent donc davantage la vitesse d'un front de déflagration macroscopique dans une poudre et ne sont pas représentatives des fronts de déflagration dans les cristaux. Une vitesse de déflagration a également été obtenue par Johnson *et al.* [10] par pyrométrie optique, pour un cristal de HMX soumis à un choc d'environ 20 GPa. Il est néanmoins probable que le cristal ait été broyé par le choc. De même que pour les mesures précédentes, il est donc possible que la vitesse de déflagration obtenue retranscrive également un comportement macroscopique. Le dispositif employé pour réaliser cette mesure est celui présenté en section 2.3. La figure 7.3 regroupe les mesures de vitesses de déflagration présentées ci-dessus.

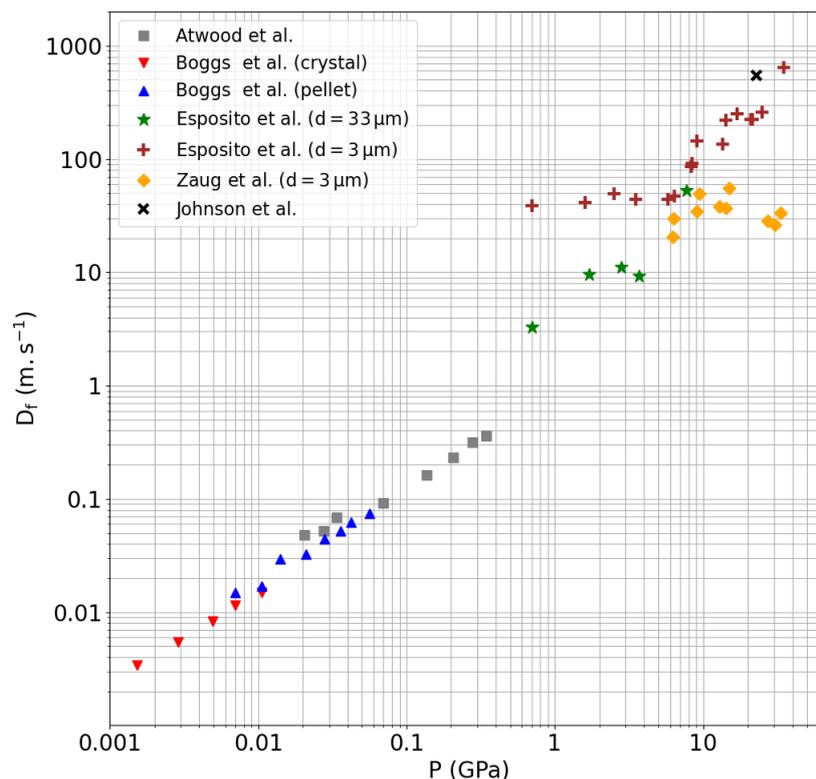


FIGURE 7.3 – Graphique montrant l'évolution des vitesses de déflagration du HMX en fonction de la pression, tirés des travaux de Atwood *et al.* [140], Boggs *et al.* [16], Esposito *et al.* [17], et Zaug *et al.* [139].

7.4 Implémentation du modèle réactif de régression de surface

Le modèle de régression de surface vise à représenter la propagation d'un front de déflagration dans les cristaux énergétiques. Comme nous avons pu le voir en section 7.3, ce modèle nécessite de connaître la surface des grains au cours des simulations. Cependant, lors de l'initialisation de la géométrie des simulations, les milieux sont projetés sur une grille eulérienne. Les interfaces des cristaux de la microstructures sont alors perdues. Il est donc nécessaire d'implémenter une méthode permettant de reconstruire la surface des cristaux qui n'est pas explicitement représentée dans le calcul.

Pour intégrer ce modèle réactif dans le code OURANOS, deux algorithmes ont été implémentés. Ces deux algorithmes sont indépendants et ils ont tous deux pour objectif de reconstruire les front de déflagration amorcés à la surface des cristaux. Le premier est basé sur la méthode de Youngs, tandis que le second est basé sur la méthode de propagation des fronts d'ondes. Ils sont décrits dans les deux sous-sections suivantes.

7.4.1 Algorithme basé sur la méthode de Youngs

Le premier algorithme implémenté est basé sur la méthode de Youngs et se déroule en deux étapes. Dans un premier temps, la méthode de Youngs est employée afin de reconstruire la surface des cristaux énergétiques et d'y amorcer les réactions. Elle est ensuite appliquée à la fraction brûlée afin de reconstruire le front de déflagration et de permettre sa propagation.

Principe de la méthode de Youngs

Les méthodes dites « VOF »^a consistent à reconstruire les interfaces de matériaux à partir de la fraction volumique des matériaux dans une maille donnée et ses mailles voisines [141]. La méthode de Youngs, aussi appelée « PLIC »^b, est une méthode VOF où les interfaces reconstruites sont représentées par des droites. Son fonctionnement est détaillé ci-dessous.

Considérons un maillage cartésien bidimensionnel dans lequel plusieurs matériaux sont présents. Les mailles ne contenant qu'un seul matériau sont appelées des mailles pures, tandis que les mailles contenant plusieurs matériaux sont appelées des mailles mixtes. Pour une maille mixte donnée i , les fractions volumiques aux frontières de la maille sont calculées à partir des mailles voisines.

a. Volume Of Fluid

b. Piecewise Linear Interface Reconstruction

Dans la méthode de Youngs, elles sont approchées par les relations [142] :

$$\alpha_\nu \approx \frac{\alpha_{NE} + 2\alpha_E + \alpha_{SE}}{4} \quad (7.13)$$

$$\alpha_\gamma \approx \frac{\alpha_{NW} + 2\alpha_N + \alpha_{NE}}{4} \quad (7.14)$$

$$\alpha_\beta \approx \frac{\alpha_{NW} + 2\alpha_W + \alpha_{SW}}{4} \quad (7.15)$$

$$\alpha_\delta \approx \frac{\alpha_{SW} + 2\alpha_S + \alpha_{SE}}{4} \quad (7.16)$$

où α correspond à la fraction volumique de la phase considérée dans la maille, et où les indices associés à ces grandeurs correspondent à la configuration illustrée en figure 7.4.

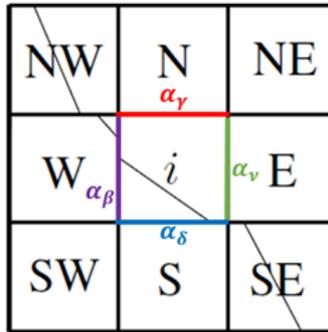


FIGURE 7.4 – Illustration de la méthode de Youngs appliquée à une maille mixte. À chaque frontière de la maille est attribuée une fraction volumique notée α .

À partir de ces fractions volumiques, la normale à l'interface s'exprime par la relation [143] :

$$\vec{n}_i = -\frac{\nabla\alpha_i}{\|\nabla\alpha_i\|} \quad (7.17)$$

avec \vec{n}_i la normale à l'interface dans la maille i et α_i la fraction volumique dans cette maille. Dans le cas d'un maillage régulier, le gradient de la fraction volumique est approximé par [143] :

$$\frac{\partial\alpha_i}{\partial x} \approx \frac{\alpha_\nu - \alpha_\beta}{2\Delta x} \quad (7.18)$$

$$\frac{\partial\alpha_i}{\partial y} \approx \frac{\alpha_\gamma - \alpha_\delta}{2\Delta y} \quad (7.19)$$

où Δx et Δy correspondent respectivement aux tailles de mailles en x et en y .

L'interface est ensuite orientée dans la maille selon sa normale et positionnée afin que la fraction volumique α_i soit respectée. En appliquant cette méthode dans toutes les mailles mixtes de la grille eulérienne, l'interface du matériau est entièrement reconstruite.

Dans la pratique, la méthode employée dans la méthode de Youngs pour déterminer la normale à l'interface peut être vue comme l'utilisation d'un stencil particulier [144]. D'autres stencils ont été proposés dans la littérature pour l'implémentation de la méthode de Youngs [145, 146].

Algorithme développé

Dans le modèle réactif de régression de surface, il est supposé que les réactions chimiques s'amorcent à la surface des grains énergétiques et qu'elles se propagent ensuite *via* un front de déflagration.

La première étape de l'implémentation de ce modèle réactif consiste à reconstruire la surface des cristaux de HMX au repos. À l'initialisation d'une simulation, le maillage de la microstructure est projeté sur une grille eulérienne. Les cristaux sont donc fusionnés et leurs interfaces sont perdues. Cependant, une solution peut être apportée en différenciant chacun des cristaux. Ainsi, des mailles mixtes sont créées aux interfaces entre deux cristaux, qu'il est possible de reconstruire avec la méthode de Youngs.

Dans le code OURANOS, les objets d'une simulation sont rassemblés en sous-ensembles, caractérisés par un identifiant. Si deux objets sont rassemblés dans un même sous-ensemble, alors ils seront traités comme un unique objet. Par conséquent, si tous les cristaux de HMX sont regroupés dans le même sous-ensemble, toutes les mailles de la microstructure seront pures. Comme la méthode de Youngs est appliquée sur des mailles mixtes, aucune surface ne sera reconstruite. Pour permettre la reconstruction de la surface des cristaux avec la méthode de Youngs, il est donc nécessaire que chaque cristal soit considéré comme un ensemble indépendant. Pour cela, à chaque cristal est attribué un identifiant correspondant à un sous-ensemble donné.

— Attribution d'identifiants aux cristaux de la microstructure :

Dans les simulations numériques, l'utilisation de nombreux sous-ensembles induit une augmentation du temps de calcul considérable. Kaeshammer [27] a réalisé des simulations mésoscopiques d'impact de plaque sur des microstructures à base de RDX et de cire contenant plus de 250 grains avec OURANOS. Pour une même microstructure, le temps de calcul nécessaire aux simulations était dix fois plus important lorsqu'un sous-ensemble était attribué à chaque grain. Dans nos simulations numériques, la microstructure est composée de plusieurs dizaines de milliers de cristaux. L'attribution d'un sous-ensemble à chaque cristal n'est donc pas envisageable.

La solution retenue pour que les cristaux adjacents soient traités comme des matériaux indépendants est la création de groupes de grains. Des groupes sont formés de telle sorte que deux cristaux énergétiques adjacents aient des identifiants différents, et appartiennent donc à deux groupes différents. Pour ce faire, une triangulation de Delaunay est effectuée sur les germes des grains. La triangulation de Delaunay est utilisée pour déterminer les plus proches voisins. En appliquant la triangulation aux germes, l'identification des grains voisins est facilitée. Ainsi, à chaque germe de la microstructure est attribué un identifiant différent de ses voisins. Chaque cristal est ensuite associé le même identifiant que son germe. Une description du procédé est

illustrée en figure 7.5.

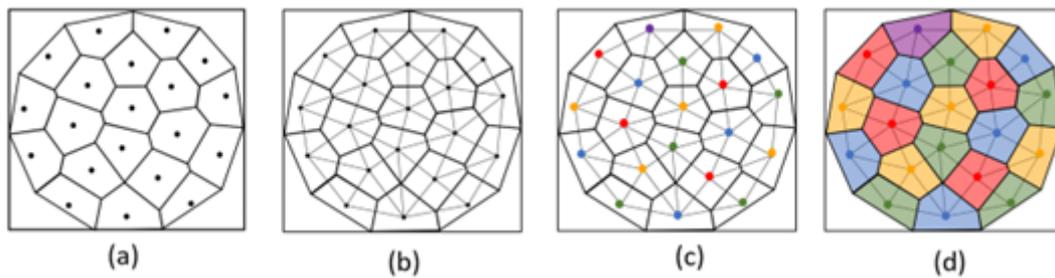


FIGURE 7.5 – Illustration du procédé d'attribution d'identifiants aux grains de la microstructure : (a) Ensemble de grains polygonaux avec leurs germes, (b) Triangulation réalisée sur les germes des grains, (c) Attribution des identifiants aux germes, (d) Attribution des identifiants aux grains à partir de l'identifiant de leurs germes.

Cette méthode permet de disposer de microstructures dont les grains sont traités indépendamment de leurs voisins, tout en réduisant considérablement le nombre de sous-ensembles traités par OURANOS : seuls 8 ensembles de grains sont nécessaires pour une microstructure contenant 500000 grains. Une illustration d'une microstructure après attribution des identifiants est présentée en figure 7.6. Sur cette figure, les grains d'une même couleur appartiennent au même groupe de grains.

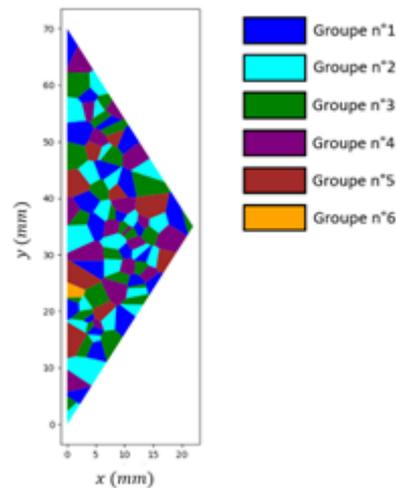


FIGURE 7.6 – Illustration d'une microstructure après attribution des identifiants par groupe.

Une fois l'identification des groupes de grains réalisée, il est désormais possible de reconstruire la surface des cristaux de façon exhaustive.

— Amorçage de la surface des cristaux :

Lors des simulations, le passage du choc est détecté par le dépassement d'une pression seuil, et les réactions dans les mailles mixtes sont alors activées avec la vitesse de réaction :

$$\frac{d\lambda_i}{dt} = \frac{S}{\alpha_i V_m} D_{f_i}(P) \quad \text{si } P > P_{seuil} \quad (7.20)$$

avec λ_i la fraction massique de la phase i , α_i sa fraction volumique, $D_{f_i}(P)$ sa vitesse de déflagration, P la pression dans la maille mixte, V_m le volume de la maille, S la surface de l'interface reconstruite dans la maille avec la méthode de Youngs, et P_{seuil} la pression seuil employée pour détecter le passage du choc.

— Propagation du front de déflagration :

Une fois les réactions chimiques amorcées en périphérie des grains, il est nécessaire de modéliser la propagation du front de déflagration dans le HMX. Pour cela, une méthode de Youngs modifiée est employée. Son fonctionnement est similaire à celui présenté en section 7.4.1, mais elle est appliquée à la fraction brûlée au lieu de la fraction volumique. Cela permet de reconstruire l'interface entre le HMX solide et les produits de détonation qui correspond au front de déflagration. Cette reconstruction n'est réalisée que dans les mailles initialement pures : le front de déflagration se propage à l'intérieur des cristaux. Dans ces mailles, la vitesse de réaction est toujours calculée avec l'équation 7.20, la seule différence étant que S représente désormais la surface de l'interface entre le HMX solide et les produits de détonation obtenue par reconstruction avec la méthode de Youngs. Avec la méthode de Youngs, la détermination de la surface S dans une maille donnée est déterminée uniquement à partir de ses mailles voisines. Par conséquent, il est possible de déterminer une surface S non nulle dans une maille pure avec une fraction brûlée nulle. Pour propager le front de déflagration à une maille pure donnée, les réactions ne sont activées que quand la fraction brûlée d'une maille voisine dépasse une valeur seuil λ_{seuil} . Sans cette valeur seuil, à chaque pas de temps, chaque maille en train de réagir activerait ses mailles voisines, ce qui entraînerait une propagation trop rapide du front de déflagration. Avec cette méthode, la vitesse de propagation de la déflagration est également influencée par la valeur seuil. Si une vitesse de déflagration $D_{f,input}$ est employée comme donnée d'entrée, alors elle engendrera une vitesse de déflagration apparente $D_{f,app} = (D_{f,input}/\lambda_{seuil})$ (voir annexe C pour plus de détail).

7.4.2 Algorithme basé sur la méthode de propagation de front d'onde

Un second algorithme visant à reconstruire les fronts de déflagration a été implémenté. Cette fois-ci, l'algorithme est basé sur la méthode de propagation de front d'onde, qui consiste à modéliser la propagation d'une onde de détonation par une onde géométrique se propageant à vitesse constante.

Principe de la méthode de propagation de front d'onde

Pour illustrer son fonctionnement, considérons un explosif et son maillage. On suppose que l'onde de détonation est initiée en un point quelconque P situé à l'intérieur du milieu (figure 7.7).

Le temps d'arrivée de l'onde est calculé au nœud de chaque maille de l'explosif. Lorsqu'un nœud est en vue directe du point d'amorçage, *i.e.* lorsqu'il n'y a pas d'obstacle entre le nœud et le point d'amorçage, le temps d'arrivée correspond à la distance entre ces deux points, divisée par la vitesse de l'onde (voir figure 7.7). On notera t_{min} et t_{max} , les temps d'arrivée minimum et maximum associés à une maille. Ainsi, lors de la simulation numérique :

- si $t \leq t_{min}$, alors l'onde de détonation n'a pas atteint l'élément et il est au repos ;
- si $t \geq t_{max}$, alors l'onde de détonation a dépassé l'élément. Il a donc entièrement réagi, et ne contient que des produits de détonation ;
- si $t_{max} \geq t \geq t_{min}$, alors l'élément est en train d'être traversé par l'onde de détonation. La position de l'onde de détonation est alors reconstruite en interpolant linéairement le temps entre les sommets. L'avancement des réactions chimiques est calculé par la relation $\lambda = V_{brulee}/V_{maille}$, où V_{brulee} correspond au volume de la partie brûlée de la maille.

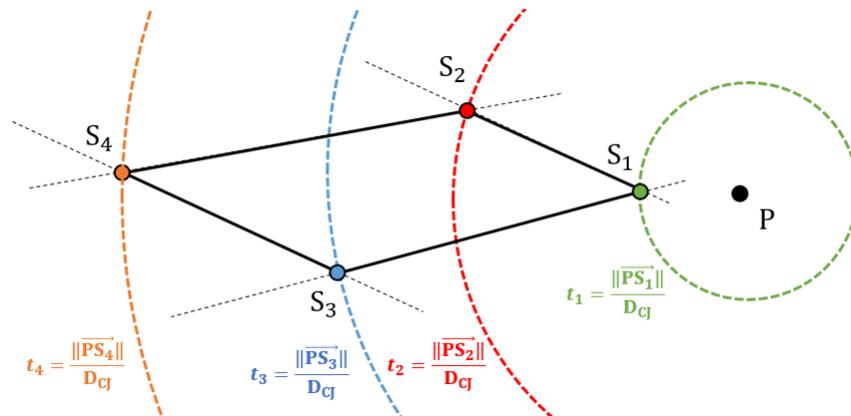


FIGURE 7.7 – Illustration du calcul des temps d'arrivée pour une maille quadrilatérale en vue directe du point d'amorçage.

Dans certains cas, la détonation n'est pas initiée par un point, mais par une zone d'amorçage. On peut alors représenter la zone d'amorçage comme un ensemble de points d'amorçage. Pour chaque point de la zone d'amorçage, le temps d'arrivée maximum de la maille est calculé. Le temps d'arrivée maximal, pour la zone d'amorçage, est ensuite déterminé comme le plus petit temps d'arrivée maximum. De même, le temps d'arrivée minimum de la maille, pour la zone d'amorçage, est déterminé comme le plus petit temps d'arrivée minimum.

Pour des configurations plus complexes, où des obstacles existent entre le point d'amorçage et les sommets des mailles, les temps d'arrivée sont calculés en déterminant le chemin optique de l'onde [147].

Algorithme développé

La méthode de propagation de front d'onde est généralement employée pour modéliser la propagation d'ondes possédant une vitesse constante. Dans le modèle réactif de régression de surface, la vitesse des fronts de déflagration n'est pas nécessairement constante. Une adaptation de la méthode de propagation des fronts d'onde a donc été requise.

Considérons un explosif et son maillage. On suppose que la déflagration est initiée en un point quelconque P du domaine. Afin de permettre la modélisation d'une onde de vitesse non constante, ce ne sont désormais plus les temps d'arrivée de l'onde aux sommets du maillage qui sont calculés, mais les distances des sommets au point d'amorçage (figure 7.8). Ainsi, pour chaque maille numérotée i , la distance du point d'amorçage à chacun de ses nœuds est calculée. On note alors d_{min} et d_{max} les distances minimale et maximale, correspondant respectivement à la distance nécessaire pour que l'onde issue de P entre et sorte de la maille i . Lors des simulations, pour une maille donnée i , la distance d parcourue par le front de déflagration issu du point P est calculée à partir de ses informations locales :

$$d_i = \int D_{f,i} dt \text{ avec } D_{f,i} = \begin{cases} D_f(P_i) & \text{si } P_i > P_{seuil} \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (7.21)$$

où P_i correspond à la pression dans la maille i , D_f à la vitesse de déflagration et P_{seuil} est une pression seuil correspondant à la pression d'activation du point d'amorçage P .

L'avancement de la réaction dans la maille est ensuite déterminé de la manière suivante :

- si $d \leq d_{min}$, alors l'onde de déflagration n'a pas atteint l'élément et donc $\lambda = 0$;
- si $d \geq d_{max}$, alors l'onde de déflagration a dépassé l'élément. Il a donc entièrement réagi, et $\lambda = 1$;
- si $d_{max} \geq d \geq d_{min}$, alors l'élément est en train d'être traversé par l'onde de déflagration. L'avancement des réactions chimiques est alors calculée par la relation $\lambda = \frac{d-d_{min}}{d_{max}-d_{min}}$.

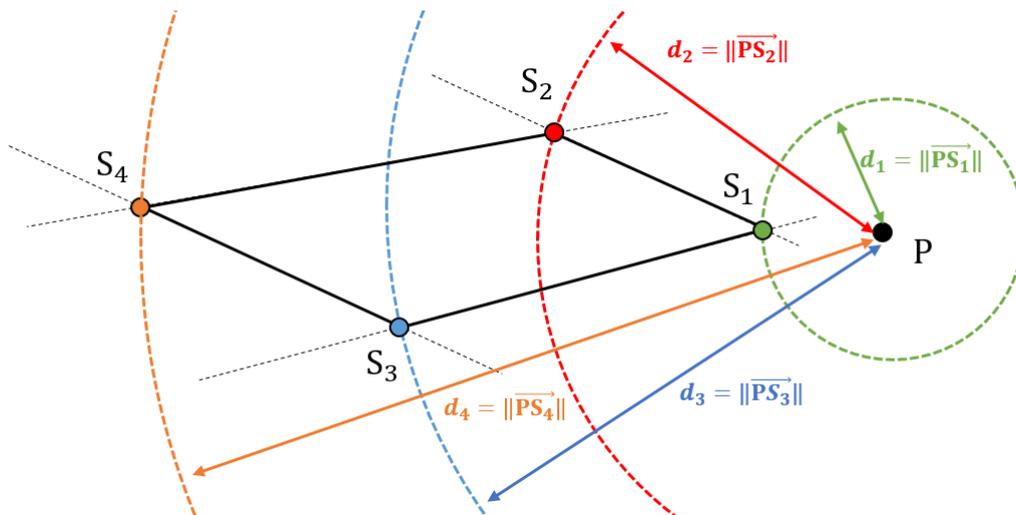


FIGURE 7.8 – Illustration du calcul des distances d’arrivée pour une maille quadrilatérale en vue directe du point d’amorçage.

Dans le cas de la régression de surface, la déflagration n’est pas initiée par un point, mais par une zone d’amorçage. On peut représenter cette zone d’amorçage comme un ensemble de points d’amorçage. Pour chaque point P de la zone d’amorçage, la distance $d_{max,P}$ de la maille est calculée. La distance maximale, pour la zone d’amorçage, est ensuite déterminé comme la plus petite distance maximale. De même, la distance minimale de la maille, pour le contour, est déterminée comme la plus petite distance minimale.

Implémentation numérique de l’algorithme

Comme nous avons pu le voir en introduction du chapitre 7, au début des simulations, le maillage lagrangien associé à la microstructure est projeté sur une grille eulérienne. Il ne sert qu’à initialiser la géométrie de l’explosif dans OURANOS. Lors de la simulation eulérienne, si les grains ne sont pas associés à des sous-ensembles indépendants comme décrit en section 7.4.1, il n’est pas possible de distinguer les grains entre eux. Les contours des grains, qui correspondent aux zones d’amorçage pour la méthode de propagation de front d’onde modifiée, ne sont donc pas identifiables. La méthode de propagation de front d’onde n’est valable que pour des milieux connexes. Pour des milieux non connexes, la notion de distance entre un point courant et un point d’amorçage n’est pas toujours définie. À titre d’exemple, la figure 7.9 illustre l’un de ces cas : l’onde issue du point d’amorçage P ne peut se propager que dans le milieu considéré. L’onde n’atteindra donc jamais le point M . L’emploi des groupes de grains et des mailles mixtes pour identifier les contours des grains n’est pas envisageable pour la méthode de propagation de front d’onde puisqu’elle mène à des milieux non connexes, et il est nécessaire de développer une méthode alternative.

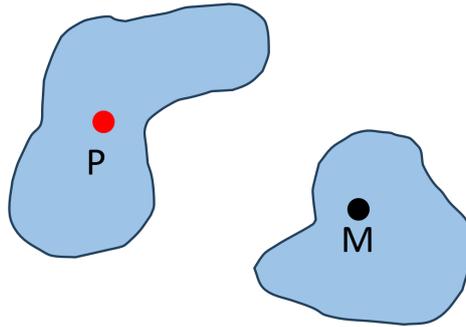


FIGURE 7.9 – Illustration d'un cas problématique dans la définition d'une distance entre un point d'amorçage noté P et un point M pour un milieu non connexe.

Afin de permettre l'utilisation de la méthode de propagation de front d'onde, le calcul des distances aux contours des grains est réalisé directement sur le maillage lagrangien de la micro-structure. Lors de la projection de ce maillage sur la grille eulérienne, les distances des mailles eulériennes aux contours sont obtenues par interpolation des distances des mailles lagrangiennes aux contours. Le calcul des distances aux contours minimales d_{min} et maximales d_{max} est ensuite réalisé uniquement à partir des mailles eulériennes. Une illustration de cette méthodologie est présentée en figure 7.10.

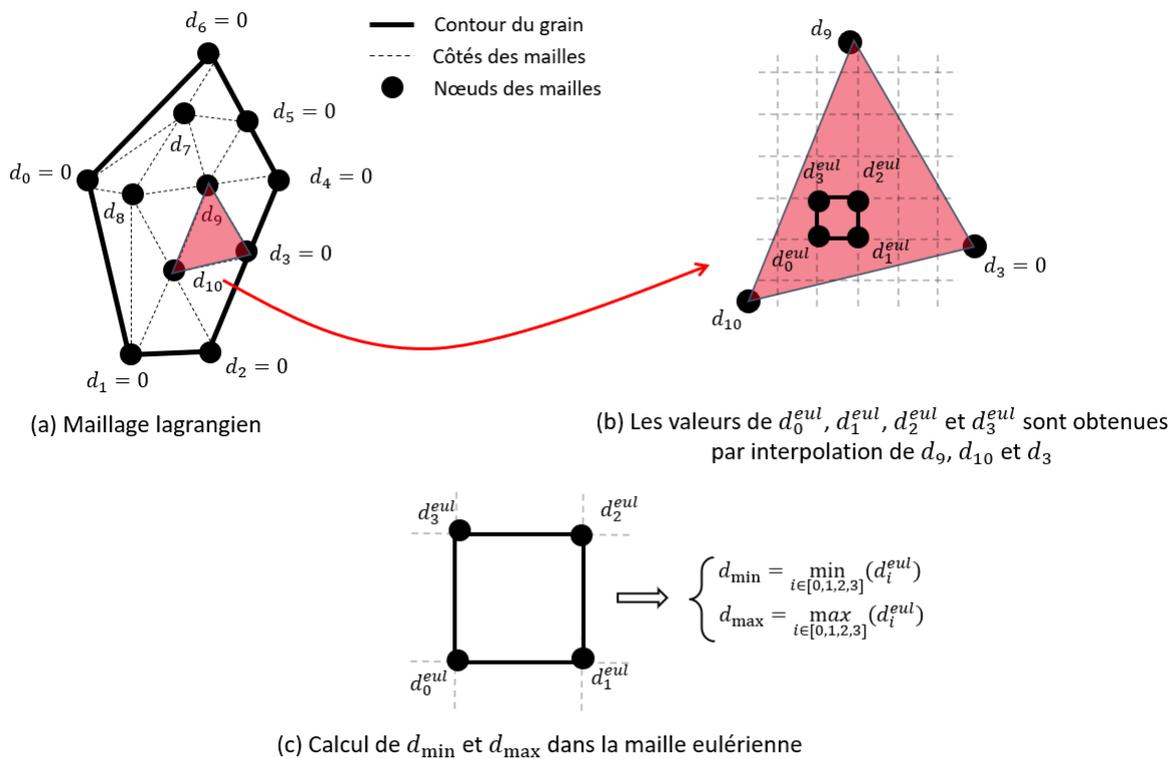


FIGURE 7.10 – Illustration de la méthodologie employée lors de la projection des distances aux contours des grains du maillage lagrangien sur la grille eulérienne employée pour les simulations numériques.

Avec cette méthodologie, le calcul des distances aux contours des grains est traité en amont de la simulation numérique. Cela permet de conserver l'information liée aux contours des grains : dans les mailles eulériennes situées à la surface d'un cristal, la distance d_{min} est nulle. Elles commenceront donc à réagir dès le passage du choc. Afin de tenir compte du mouvement de l'explosif lors du passage de l'onde de choc, les grandeurs d_{min} et d_{max} des mailles sont advectées lors de la simulations.

Problématiques liées au maillage lagrangien

Lorsque maillage lagrangien de la microstructure n'est employé que pour définir la géométrie dans OURANOS, il n'y a aucune nécessité de disposer d'un maillage fin. En revanche, dans le cadre de la méthode de propagation de front d'onde modifiée, le maillage lagrangien est également employé pour le calcul des distances aux contours. A priori, l'interpolation réalisée pour passer des distances du maillage lagrangien aux distances du maillage eulérien permet de s'émanciper de la résolution du maillage. Cependant, dans certains cas particuliers, l'utilisation d'un maillage lagrangien grossier conduit à un calcul erroné des distances aux contours. Comme le montre la figure 7.11, si l'une des mailles lagrangiennes possède trois nœuds situés sur le contour des grains, alors toutes les mailles eulériennes pour lesquelles l'interpolation est réalisée dans cette maille lagrangienne présenteront une valeur $d_{min} = d_{max} = 0$. Cela se révèle particulièrement problématique lors des simulations : lors du passage du choc, toutes ces mailles vont réagir instantanément et passer de $\lambda = 0$ à $\lambda = 1$ en un pas de temps entraînant une propagation trop rapide du front de déflagration.

Présence d'une maille triangulaire dont les trois nœuds sont sur le contour du grain

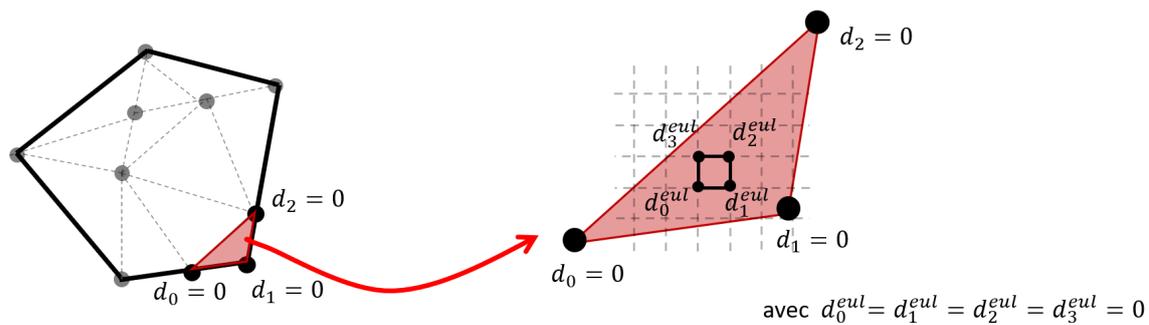


FIGURE 7.11 – Illustration du biais engendré par la présence d'éléments triangulaires dont les trois nœuds sont situés sur le contour d'un grain.

Le calcul des distances peut également être erroné si aucun nœud du maillage lagrangien n'est positionné au point le plus éloigné du contour (voir figure 7.12). Ainsi, lors de l'interpolation des mailles eulériennes, les distances calculées seront sous-estimées par rapport à leur vraie valeur. Lors d'une simulation numérique, les réactions dans ces grains seront donc accélérées.

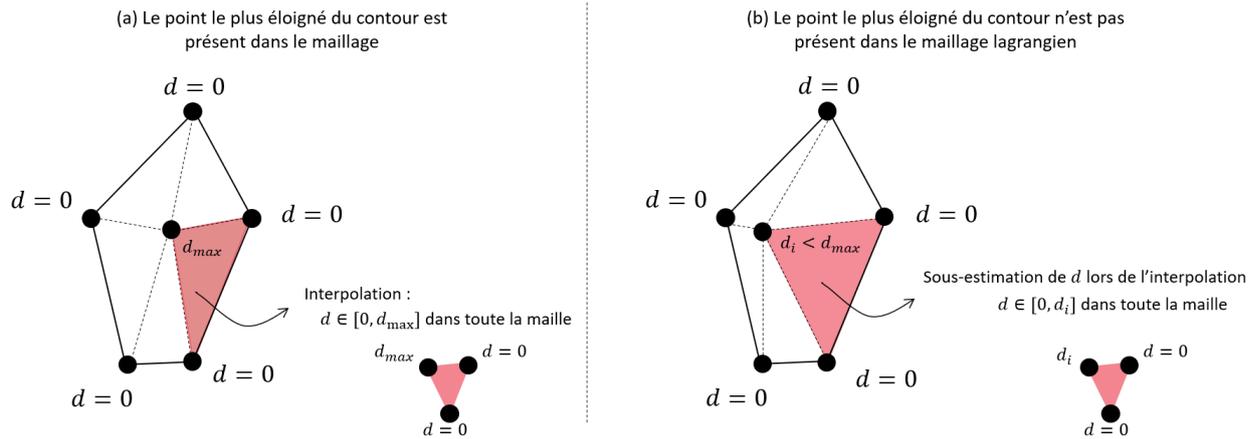


FIGURE 7.12 – Illustration du biais engendré par l'absence du point le plus éloigné du contour du grain dans le maillage lagrangien lors du calcul des distances aux contours.

Plusieurs solutions ont donc été envisagées pour éviter ces problèmes. Tout d'abord, l'utilisation d'un maillage lagrangien plus fin que le maillage eulérien permettrait de résoudre ces cas pathologiques. Cependant, les temps de calculs se révèlent trop importants lorsque les microstructures sont fines. Un maillage avec des quadrangles a également été envisagé, cependant, l'algorithme employé nativement dans OURANOS pour interpoler les distances eulériennes à partir des distances lagrangiennes pour un maillage quadrangulaire segmente les mailles en mailles triangulaires. Ainsi, lorsque trois nœuds d'une maille quadrangulaire sont situés sur les contours d'un grain, la même problématique que celle présentée en figure 7.11 est rencontrée. De plus, le cas particulier présenté en figure 7.12 n'est pas résolu non plus.

La solution adoptée a finalement été de mailler chaque grain de la microstructure à partir de son squelette morphologique. Le squelette morphologique d'un polygone peut être défini comme l'ensemble des points tels que deux fronts d'onde, de vitesse constante et égale, issus des contours de ce polygone s'y rencontrent [148] (voir figure 7.13). Pour chaque grain de la microstructure, les nœuds du maillage lagrangien sont donc placés aux intersections des branches de son squelette. Comme le point le plus éloigné du contour de chaque grain correspond au point d'intersection de tous les fronts d'ondes issus des contours, il sera compris dans cet ensemble de points. De plus, avec cette méthode de maillage, toutes les mailles obtenues possèdent au moins un de leurs trois sommets hors du contour du grain. Les cas particuliers présentés en figure 7.11 et 7.12 sont donc résolus.

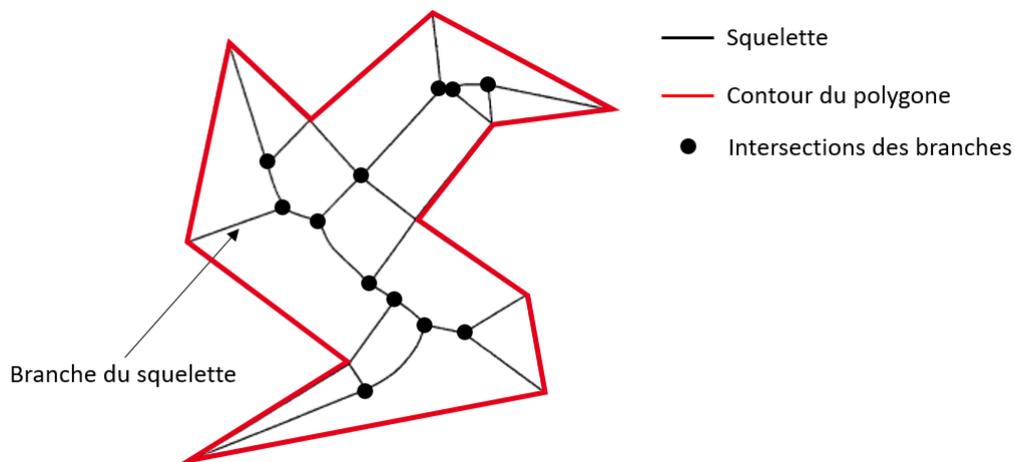


FIGURE 7.13 – Schéma de principe du squelette morphologique d'un polygone inspiré des travaux d'Attali [148].

Dans ce contexte, le calcul de la distance minimale d'une maille i au contour du grain est réalisé. Lors des simulations, la grandeur calculée est l'intégrale de la vitesse de déflagration locale $d_i = \int^t D_f(P_i) dt$. Le front de déflagration est alors localisé dans la maille où ces deux grandeurs sont égales $d_i = d_{min}$ (voir section 7.4.2).

Nous avons choisi d'employer cette méthode bien que, dans la pratique, elle n'est valable que lorsque toute la surface du grain est amorcée au même moment. Dans le cas d'un choc défilant, cette condition n'est pas vérifiée et il faudrait donc recalculer la distance des mailles au front de déflagration le plus proche à chaque pas de temps. Au regard des coûts de calcul que cela engendrerait, cette option n'est pas envisageable.

La méthode de propagation de front d'onde devrait néanmoins fournir une bonne approximation de la combustion des grains sous choc si, au cours du temps nécessaire à l'onde de choc pour traverser entièrement le grain, le front de déflagration s'est peu propagé.

Validation du modèle réactif

Sommaire

8.1	Validation des modèles de régression de surface appliqués à un disque isolé	135
8.1.1	Algorithme basé sur la méthode d'Youngs	136
8.1.2	Algorithme basé sur la méthode de propagation de front d'onde	138
8.2	Comparaison des méthodes appliquées à un test du coin	139
8.3	Synthèse	144

Dans la section 7.4, deux algorithmes ont été développés afin de modéliser la régression de surface des grains de HMX. L'objectif de ce chapitre est de valider ces algorithmes pour garantir que le modèle réactif soit bien représentatif d'une régression de surface. Dans un premier temps, un cas de validation est employé afin de vérifier la capacité des algorithmes à reproduire le modèle de régression de surface. Dans un second temps, ils sont appliqués à un test du coin et comparés entre eux.

8.1 Validation des modèles de régression de surface appliqués à un disque isolé

L'objectif de cette section est de valider les algorithmes développés en section 7.4. Pour cela, un cas de validation a été réalisé, consistant à reproduire la régression en surface d'une particule circulaire. Ainsi, l'évolution du rayon de la particule serait $R(t) = R_0 - D_f t$ avec R_0 le rayon initial de la particule, t le temps et D_f la vitesse du front de déflagration consommant la particule. Pour réaliser ce cas de validation, un disque de HMX d'un rayon de $500 \mu\text{m}$ a été isolé dans un liant inerte. Un champ de pression uniforme, supérieure à la pression P_{seuil} , est appliqué à tout le domaine afin d'activer la cinétique sur toute la surface du cristal. Les simulations sont réalisées avec une vitesse de déflagration constante $D_f = 100 \text{ m s}^{-1}$. Les dimensions du domaine sont de $20 \text{ mm} \times 20 \text{ mm}$ et ont été choisies afin d'éviter la réflexion des ondes de compression pendant la combustion du grain. La résolution du maillage est de $10 \mu\text{m}$. Une illustration de ce cas de validation est présentée en figure 8.1.

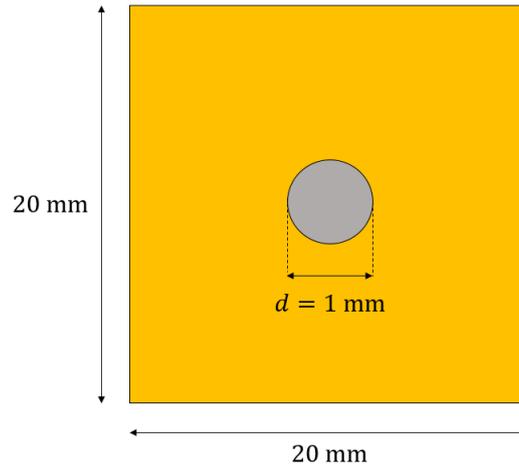


FIGURE 8.1 – Cas de validation d’un grain de HMX isolé dans un liant. La configuration est bidimensionnelle et le grain est représenté par un disque.

8.1.1 Algorithme basé sur la méthode d’Youngs

Comme mentionné en section 7.3, la vitesse de propagation du front de déflagration dépend d’une valeur λ_{seuil} et vaut $D_{f,app} = (D_{f,input}/\lambda_{seuil})$. Afin de juger de l’impact de ce paramètre sur la reconstruction du front de déflagration, les simulations ont été réalisées pour quatre valeurs de λ_{seuil} (0.1 ; 0.5 ; 0.9 ; 0.999). Pour chacune de ces simulations, la valeur de $D_{f,input}$ est adaptée afin que la vitesse de déflagration apparente soit égale à $D_{f,app} = 100 \text{ m s}^{-1}$. Ainsi, les différences observées ne résultent que des biais liés à la reconstruction de surface.

Sur la figure 8.2, les isosurfaces $\lambda = 0.5$ des champs de fraction brûlée issus de ces simulations sont tracées pour différents temps. Elles sont superposées au grain initial à titre de visualisation. Pour un λ_{seuil} de 0.1, les réactions ne sont pas assez rapides pour qu’une fraction brûlée de 0.5 soit atteinte à $t = 0.2 \mu\text{s}$. Ce temps n’est donc pas représenté sur la figure 8.2 pour le cas $\lambda_{seuil} = 0.1$. À l’exception du cas $\lambda_{seuil} = 0.1$, on peut voir que l’algorithme basé sur la méthode d’Youngs permet de reconstruire un front de déflagration sphérique au début des simulations ($t < 3 \mu\text{s}$). À partir de $t = 3 \mu\text{s}$, le front de déflagration se plisse, et sa forme diverge de celle d’un cercle. À $t = 4.0 \mu\text{s}$, ces plissements s’atténuent pour la simulation à $\lambda_{seuil} = 0.5$. Pour les cas où $\lambda_{seuil} > 0.5$, cette atténuation apparaît plus tardivement.

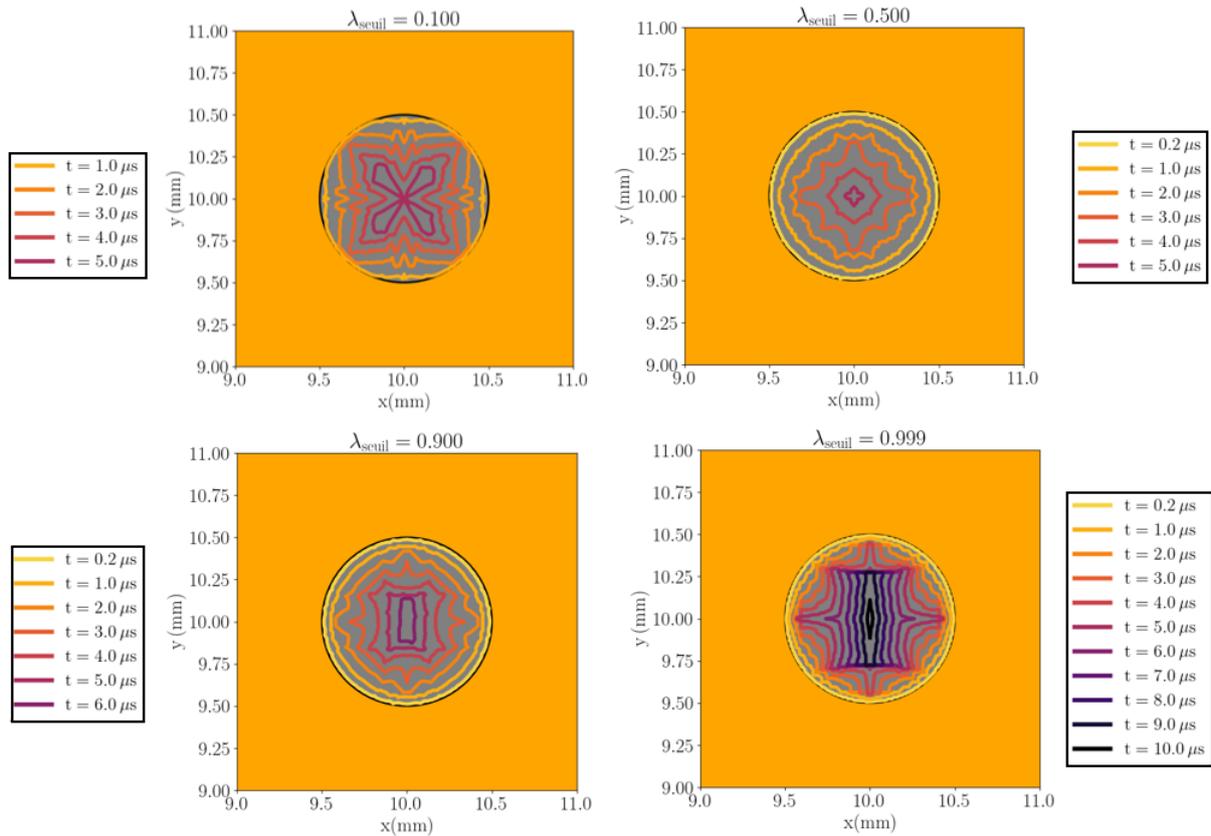


FIGURE 8.2 – Illustration de la forme du front de déflagration reconstruit par l’algorithme basé sur la méthode d’Youngs à différents instants, pour quatre valeurs de λ_{seuil} .

Pour chaque instant, le rayon équivalent des surfaces $\lambda = 0.5$ du front de déflagration a également été calculé grâce à la relation :

$$R_{eq}(t) = \sqrt{\frac{S(t)}{\pi}} \quad (8.1)$$

avec S la surface de l’isosurface $\lambda = 0.5$.

L’évolution temporelle des rayons équivalents ainsi obtenue est présentée en figure 8.3. L’évolution temporelle d’un grain de HMX de rayon initial $R_0 = 500 \mu m$ consommé par un front de déflagration à la vitesse D_f est tracée comme référence. Pour les simulations avec $\lambda_{seuil} = 0.1$ et $\lambda_{seuil} = 0.999$, l’algorithme diverge fortement du cas de référence. De meilleurs résultats sont obtenus pour des valeurs de λ_{seuil} égales à 0.5 et 0.9.

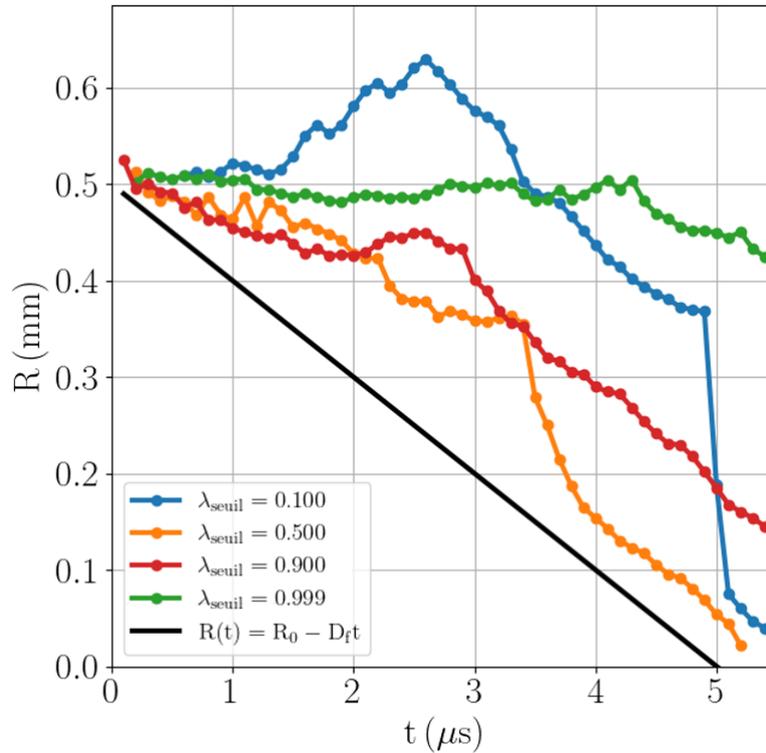


FIGURE 8.3 – Évolution temporelle du rayon équivalent du grain obtenue lors du cas de validation avec l’algorithme basé sur la méthode d’Youngs pour quatre valeurs de λ_{seuil} .

Les temps de combustion obtenus sont systématiquement plus longs que la référence théorique. Néanmoins, le cas $\lambda_{seuil} = 0.5$ permet d’obtenir une bonne approximation de ce temps de combustion.

Configuration	$\lambda_{seuil} = 0.1$	$\lambda_{seuil} = 0.5$	$\lambda_{seuil} = 0.9$	$\lambda_{seuil} = 0.999$	Cas analytique
$t_{comb}(\mu\text{s})$	6.0 ± 0.05	5.4 ± 0.05	6.8 ± 0.05	> 10	5.0

TABLE 8.1 – Tableau récapitulant les temps de combustion obtenus avec l’algorithme basé sur la méthode d’Youngs lors du cas de validation pour quatre valeurs de λ_{seuil} .

Au vu de ces résultats, l’utilisation d’un $\lambda_{seuil} = 0.5$ apparaît comme étant le plus adapté à la reconstruction du front de déflagration.

8.1.2 Algorithme basé sur la méthode de propagation de front d’onde

L’algorithme basé sur la méthode de propagation de front d’onde a également été employé pour réaliser le cas de validation. Sur la figure 8.4, les isosurfaces $\lambda = 0.5$ des champs de fraction brûlée issus de la simulation est tracée pour différents temps. Elles sont superposées au grain initial à titre de visualisation. On peut ainsi voir que le front de déflagration reste sphérique durant toute la simulation.

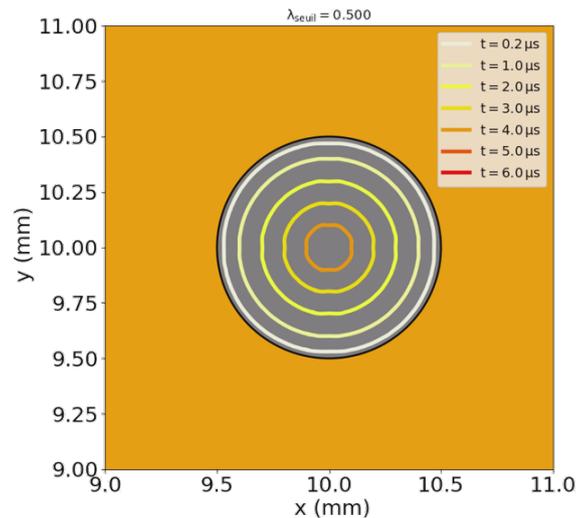


FIGURE 8.4 – Illustration de la forme du front de déflagration reconstruit par l'algorithme basé sur la méthode de propagation de front d'onde à différents instants.

L'évolution temporelle des rayons équivalents, calculés avec la relation 8.1, a également été tracée et est présentée en figure 8.5. Les deux courbes sont presque confondues. L'algorithme basée sur la méthode de propagation de front d'onde reproduit bien la régression de surface du grain de HMX. Le temps de combustion obtenu est de $t_{comb} = 4.95 \pm 0.05 \mu s$, ce qui est très proche du temps de combustion obtenu dans le cas analytique.

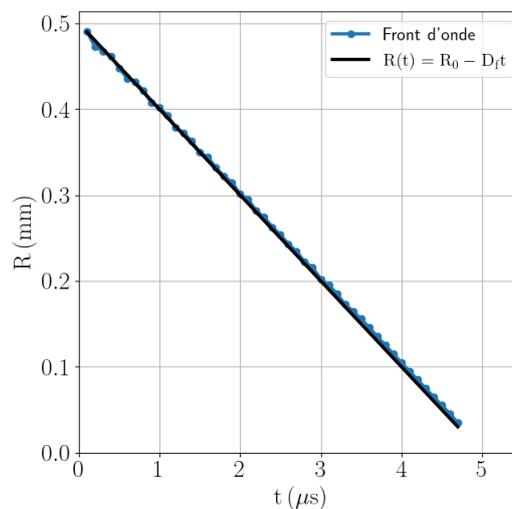


FIGURE 8.5 – Évolution temporelle du rayon équivalent du grain obtenu lors du cas de validation avec l'algorithme basé sur la méthode de propagation de front d'onde.

8.2 Comparaison des méthodes appliquées à un test du coin

Dans la section précédente, le cas de validation réalisé avec l'algorithme basé sur la méthode de propagation de front d'onde permet de très bien reproduire la régression d'un grain de HMX isolé. En revanche, pour l'algorithme basé sur la méthode d'Youngs avec un $\lambda_{seuil} = 0.5$, le front de déflagration est moins bien reconstruit. L'objectif de cette nouvelle section est d'appliquer

ces deux algorithmes à une simulation de test du coin. Pour cela, une microstructure avec un diamètre équivalent moyen de $162\ \mu\text{m}$ a été générée. La vitesse de l'impacteur, quant à elle, est de $500\ \text{m s}^{-1}$. La résolution du maillage est de $10\ \mu\text{m}$.

Dans un premier temps, les simulations sont réalisées avec une vitesse de déflagration constante et égale à $D_f = 200\ \text{m s}^{-1}$. La figure 8.6 illustre les champs de fraction brûlée issus de ces simulations à différents instants. Seule une zone de dimensions $2\ \text{mm} \times 2\ \text{mm}$ en aval du front de choc est représentée. Sur ces images, on peut voir les grains de HMX brûler suite au passage du choc. Pour l'algorithme basé sur la méthode d'Youngs, le front de déflagration semble correctement reconstruit. Contrairement aux résultats de la section 8.1.1, aucun plissement n'est observé ici. Pour l'algorithme basé sur la méthode de propagation de front d'onde, l'amorçage des réactions se fait principalement au niveau des frontières horizontales des grains, et les réactions aux frontières verticales des grains ne sont pas toujours activées par le passage du choc.

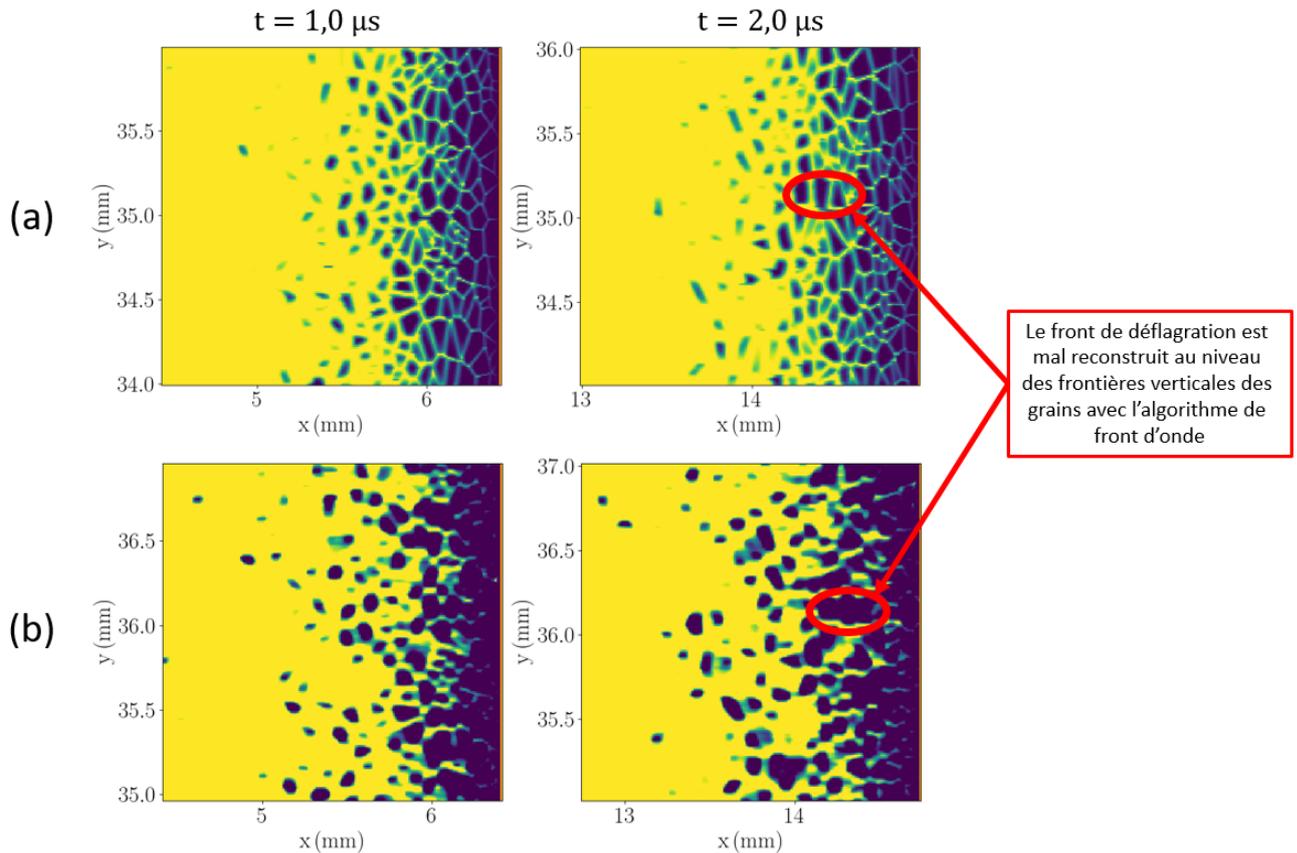


FIGURE 8.6 – Illustration des champs de fraction brûlée obtenus à deux instants lors des simulations numériques de test du coin pour l'algorithme basé sur la méthode de Youngs (a) et celui basé sur la méthode de propagation de front d'onde (b). La vitesse de déflagration employée est constante et égale à $D_f = 200\ \text{m s}^{-1}$.

Ce biais dans la reconstruction du front de déflagration avec la méthode de propagation de front d'onde provient de l'advection de la grandeur d_{min} lors de la simulation. Initialement, la grandeur d_{min} est nulle dans les mailles situées aux contours des grains, et maximale dans les mailles situées au centre des grains. Ainsi, lors du passage de l'onde de choc, la grandeur d_{min} est advectée des mailles situées à l'intérieur du grain vers celles situées sur son contour

(voir figure 8.7). Cela provoque donc une augmentation de d_{min} au niveau de la surface des grains. En effet, dans le modèle réactif, la réaction de la maille est déterminée par la condition suivante :

Si $d > d_{min}$, alors :

$$\lambda = \frac{d - d_{min}}{d_{max} - d_{min}}$$

Du fait de l'advection, d_{min} n'est plus nulle sur les frontières du grain, ce qui retarde l'apparition des réactions. Pour les frontières horizontales des grains, ce problème n'est pas rencontré car les grandeurs d_{min} sont nulles dans la direction de l'advection.

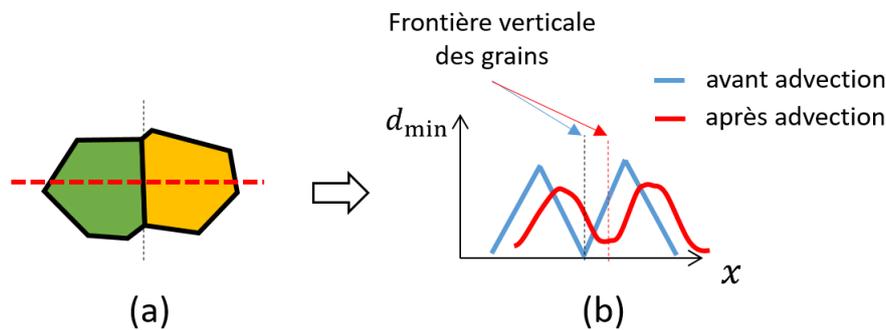


FIGURE 8.7 – (a) Exemple de deux grains voisins dont la frontière verticale est susceptible d'engendrer des retards d'amorçage des réactions lors d'une simulation numérique. Une ligne de profil passant par cette frontière est représentée. (b) Illustration des effets de l'advection sur la grandeur d_{min} sur la ligne de profil tracée en (a).

L'évolution spatiale de la vitesse du choc, extraite des simulations pour les deux algorithmes employés avec une vitesse de déflagration constante, est présentée en figure 8.8. On constate que les deux méthodes employées mènent à des évolutions de vitesse de choc du même ordre de grandeur.

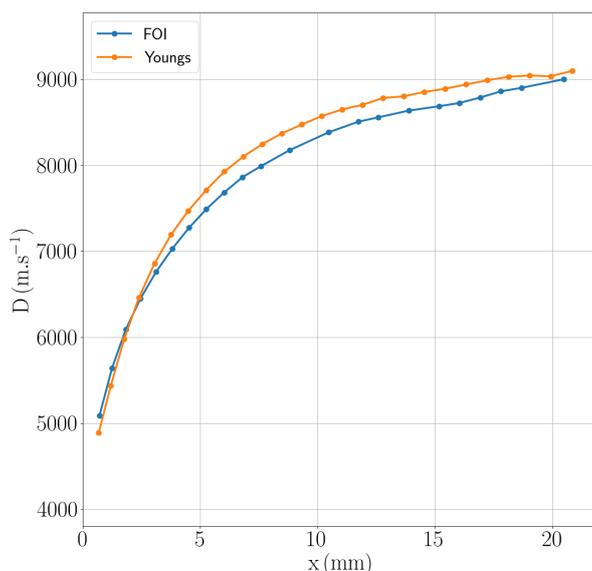


FIGURE 8.8 – Évolution spatiale de la vitesse du choc obtenue lors des simulations numériques de test du coin pour les deux algorithmes de reconstruction du front de déflagration. La vitesse de déflagration employée est constante et égale à $D_f = 200 \text{ m s}^{-1}$.

Les simulations du test du coin ont ensuite été réalisées avec une vitesse de déflagration dépendante de la pression dont les paramètres b et n valent respectivement 200 m s^{-1} et 1.4. Cette fois-ci, la reconstruction du front de déflagration diffère selon l'algorithme employé. L'accélération induite au choc est bien plus importante au début de la simulation ($x < 8 \text{ mm}$) pour l'algorithme basé sur la méthode d'Youngs.

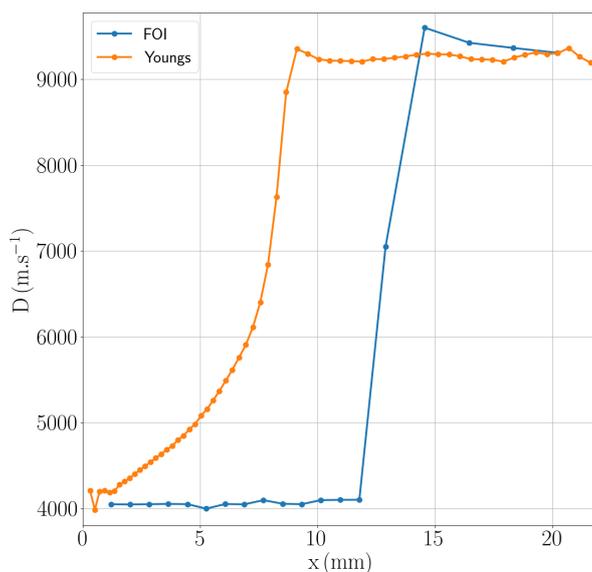


FIGURE 8.9 – Évolution spatiale de la vitesse du choc obtenue lors des simulations numériques de test du coin pour les deux algorithmes de reconstruction du front de déflagration. Les paramètres employés pour la vitesse de déflagration sont $b = 200 \text{ m s}^{-1}$ et $n = 1.4$.

Les divergences entre les deux algorithmes employés pour la reconstruction du front de déflagration sont en fait dues aux problématiques d'advection mentionnées ci-dessus pour la propagation du front d'onde. La figure 8.10 illustre le champ de fraction brûlée à deux instants donnés, pour chaque algorithme. À $t = 1.4 \mu\text{s}$, aucune frontière verticale n'est amorcée pour l'algorithme de propagation de front d'onde du fait de l'advection. Par conséquent, l'accélération induite par l'onde de choc avec cet algorithme est largement sous-estimée. Cette perte de surface réactive est particulièrement importante lorsque la vitesse de déflagration est faible. En effet, à $t = 2.0 \mu\text{s}$, le choc a accéléré et la vitesse de déflagration est plus importante, ce qui active les frontières verticales plus rapidement. Pour l'algorithme basé sur la méthode d'Youngs, les fronts de déflagration semblent toujours être correctement reconstruits.

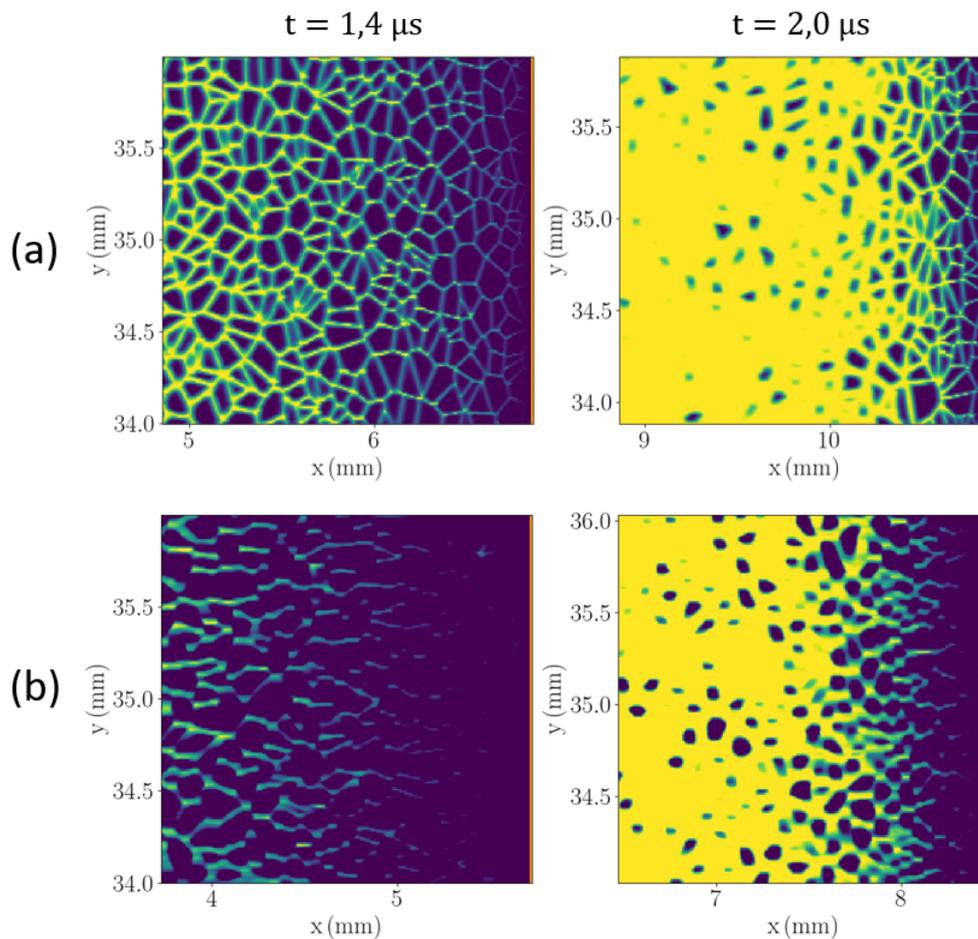


FIGURE 8.10 – Illustration des champs de fraction brûlée obtenus à deux instants lors des simulations numériques de test du coin pour l'algorithme basé sur la méthode de Youngs (a) et celui basé sur la méthode de propagation de front d'onde (b). Les paramètres employés pour la vitesse de déflagration sont $b = 200 \text{ m s}^{-1}$ et $n = 1.4$.

8.3 Synthèse

Un cas de validation correspondant à la combustion d'un grain circulaire a été réalisé afin de juger de la pertinence des deux algorithmes de reconstruction des fronts de déflagration. Pour l'algorithme basé sur la méthode de propagation des fronts d'onde, les résultats obtenus sont très proches du cas analytique. Pour l'algorithme basé sur la méthode d'Youngs, les résultats sont moins bons et dépendent de la valeur λ_{seuil} employée. L'utilisation de ce paramètre induit une différence entre la vitesse de déflagration apparente et celle utilisée comme donnée d'entrée. À vitesse apparente égale, les meilleurs résultats sont obtenus pour $\lambda_{seuil} = 0.5$. Le front de déflagration est alors correctement reconstruit aux premiers instants de sa propagation. Par la suite, des plissements apparaissent mais ceux-ci finissent par s'atténuer. Une bonne approximation du temps de combustion est néanmoins obtenue avec cette méthode.

Les algorithmes ont ensuite été appliqués à un test du coin. Pour l'algorithme basé sur la méthode de Youngs, les fronts de déflagration sont correctement reconstruits, et aucun plissement n'est observé. Avec l'algorithme de propagation de fronts d'onde, l'amorçage des réactions au niveau des frontières verticales des grains est retardée du fait de l'advection de la grandeur d_{min} dans le sens de l'écoulement. Les fronts de déflagration sont alors moins bien reconstruits. Ces retards réduisent drastiquement les réactions induites dans l'explosif lorsque la vitesse de déflagration est faible. Pour des vitesses de déflagration dépendantes de la pression, l'accélération de l'onde de choc est largement sous-estimée au début des simulations. Avec l'algorithme basé sur la méthode d'Youngs, les fronts de déflagration semblent être bien reconstruits, et les plissements observés lors du cas de validation ne sont plus présents.

Au vu de ces résultats, l'algorithme basé sur la méthode d'Youngs apparaît comme étant le plus pertinent pour modéliser la régression de surface des cristaux de HMX dans la configuration du test du coin. Dans la suite de ce manuscrit, cet algorithme sera employé pour le modèle réactif de régression de surface avec $\lambda_{seuil} = 0.5$.

Post-traitement

Sommaire

9.1	Extraction de la zone d'intérêt	145
9.2	Détermination des grandeurs moyennes	146
9.3	Distribution des grandeurs	148
9.4	Extraction du diagramme de marche	149

Une fois les simulations numériques réalisées, les fichiers de sortie générés par OURANOS sont post-traités *via* un script écrit sous Python. Ce script permet d'extraire les différentes quantités physiques d'intérêt ainsi que le diagramme de marche de l'onde de choc.

9.1 Extraction de la zone d'intérêt

La configuration sélectionnée pour modéliser la TCD est celle du test du coin. Dans cette configuration, les angles du coin sont choisis afin d'éviter que les détentes latérales ne remontent l'écoulement et ne perturbent le front de choc. Ainsi, l'écoulement derrière l'onde de choc reste en moyenne^a unidimensionnel dans la zone centrale qui est extraite et exploitée pour l'analyse des résultats. La figure 9.1 illustre le champ de vitesse selon l'axe \vec{y} à trois instants d'une simulation. Sur cette figure, on peut voir la perturbation induite par les détentes latérales. Dans les zones perturbées, la vitesse selon l'axe \vec{y} atteint des valeurs de l'ordre du kms^{-1} . Du fait de la propagation des détentes, la dimension selon l'axe \vec{y} de la zone extraite (délimitée par le cadre rouge) diminuent au cours du temps.

De cette zone d'intérêt ne sont conservés que les champs des grandeurs thermodynamiques suivantes : la pression, la masse volumique, l'énergie interne, les vitesses matérielles, la vitesse du son, la fraction brûlée, ainsi que les fractions de présence des différents matériaux. Ces informations sont ensuite stockées afin de construire une base de données de simulations numériques.

a. Avec une modélisation macroscopique de l'explosif, l'écoulement non perturbé par les détentes latérales est unidimensionnel. En revanche, dans le cas d'une modélisation mésoscopique, la représentation de la microstructure induit des fluctuations locales. L'écoulement reste cependant unidimensionnel en moyenne.

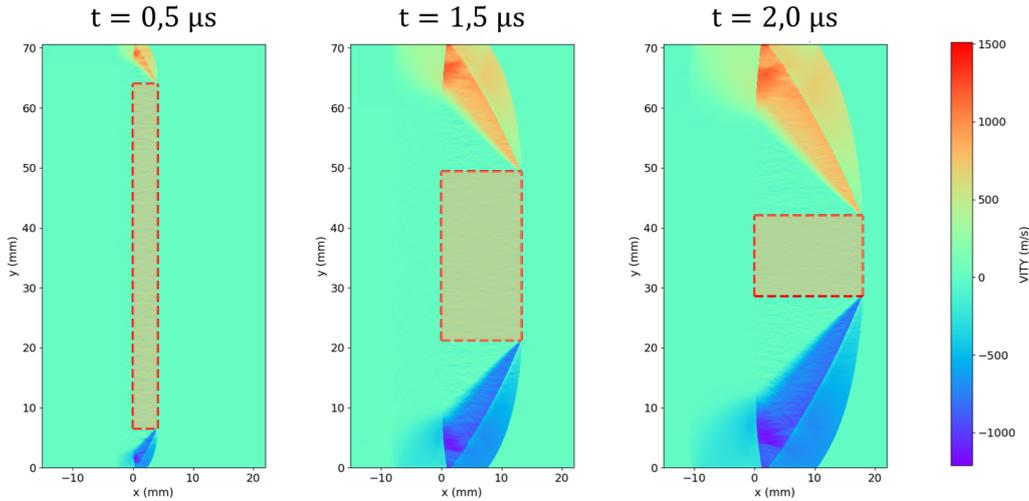


FIGURE 9.1 – Illustration du champ de vitesse matérielle dans la direction \vec{y} obtenu dans les simulations à trois instants. Les zones d'intérêt extraites sont délimitées par les cadres en pointillés rouges.

9.2 Détermination des grandeurs moyennes

Les simulations étant bidimensionnelles planes, chaque grandeur physique g peut s'exprimer par $g = g(x, y, t)$. L'écoulement étant dirigé en moyenne selon l'axe \vec{x} dans la zone d'intérêt, nous cherchons donc à déterminer l'évolution des grandeurs moyennes selon l'axe \vec{x} .

Ainsi, pour un maillage cartésien régulier, la masse volumique moyenne à une position x donnée est déterminée par une moyenne volumique :

$$\bar{\rho} = \frac{1}{N} \sum_i \sum_j \alpha_{i,j} \rho_{i,j} \quad (9.1)$$

où ρ est la masse volumique, α la fraction volumique de présence et N le nombre de mailles situés à l'abscisse x . L'indice i correspond au numéro de la maille, et l'indice j au numéro de la phase présente dans la maille i .

L'énergie moyenne, quant à elle, est déterminée par une moyenne massique :

$$\bar{e} = \frac{1}{\sum_i \sum_j \rho_{i,j}} \sum_i \sum_j \rho_{i,j} e_{i,j} \quad (9.2)$$

où e est l'énergie massique. L'indice i correspond au numéro de la maille, et l'indice j au numéro de la phase présente dans la maille i .

En revanche, plusieurs choix sont possibles pour déterminer la pression moyenne :

— moyenne par pondération volumique :

$$\bar{P} = \frac{1}{N} \sum_i \sum_j \alpha_{i,j} P_{i,j} \quad (9.3)$$

— moyenne pondérée par l'impédance acoustique :

$$\bar{P} = \frac{1}{\sum_i \sum_j \frac{\alpha_{i,j}}{\rho_{i,j} c_{i,j}}} \sum_i \sum_j \frac{\alpha_{i,j}}{\rho_{i,j} c_{i,j}} P_{i,j} \quad (9.4)$$

— moyenne pondérée par le module de rigidité :

$$\bar{P} = \frac{1}{\sum_i \sum_j \frac{\alpha_{i,j}}{\rho_{i,j} c_{i,j}^2}} \sum_i \sum_j \frac{\alpha_{i,j}}{\rho_{i,j} c_{i,j}^2} P_{i,j} \quad (9.5)$$

avec P la pression et c la vitesse du son. L'indice i correspond au numéro de la maille, et l'indice j au numéro de la phase présente dans la maille i .

Afin d'évaluer l'influence de l'opérateur de moyenne sur la détermination d'une pression moyenne, les trois opérateurs mentionnés ci-dessus ont été employés pour exploiter une simulation réalisée à vitesse de déflagration constante. Les profils obtenus sont présentés en figure 9.2. On peut ainsi constater que les trois opérateurs de moyenne donnent des résultats très similaires. Par la suite, nous emploierons une moyenne volumique pour la pression.

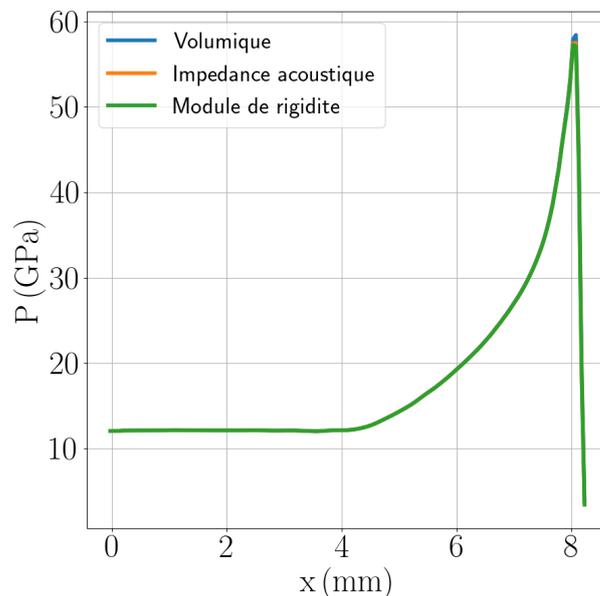


FIGURE 9.2 – Comparaison des profils moyens de pression obtenus selon l'opérateur de moyenne employé. La simulation exploitée a été réalisée avec une microstructure de diamètre équivalent moyen $\overline{d_{eq}} = 162 \mu\text{m}$, une vitesse de déflagration $D_f = 1000 \text{ m s}^{-1}$ et avec une vitesse d'impact $v_i = 832 \text{ m s}^{-1}$.

9.3 Distribution des grandeurs

Du fait de la représentation de la microstructure, les différentes grandeurs physiques présentent des fluctuations observables pour une abscisse x donnée. Afin de quantifier ces fluctuations, la distribution de chaque grandeur physique g est calculée à x et t donnés. Ainsi, à x et t donnés et pour une grandeur g , la fréquence f d'une distribution est calculée par la relation :

$$f(g_i) = \frac{N(g_i)}{N_{tot}} \quad (9.6)$$

avec N_{tot} le nombre total de mailles situées à la position x dans la zone d'intérêt. $N(g_i)$ correspond au nombre de mailles pour lesquelles $g \in [g_i - \Delta g; g_i + \Delta g]$ avec $\Delta g = \frac{g_{max} - g_{min}}{N_b}$ et $N_b = 200$ le nombre de classes (aussi appelé *bins* en anglais).

Pour chaque position x donnée, la moyenne arithmétique et l'écart-type de la grandeur sont ainsi extraits de la distribution. La figure 9.3.a illustre l'évolution de la distribution de pression obtenue au cours d'une simulation en fonction de x et à t fixé. Le profil moyen de pression et l'intervalle de confiance ($\bar{P} \pm 2\sigma$) obtenus à partir de la distribution sont présentés en figure 9.3.b.

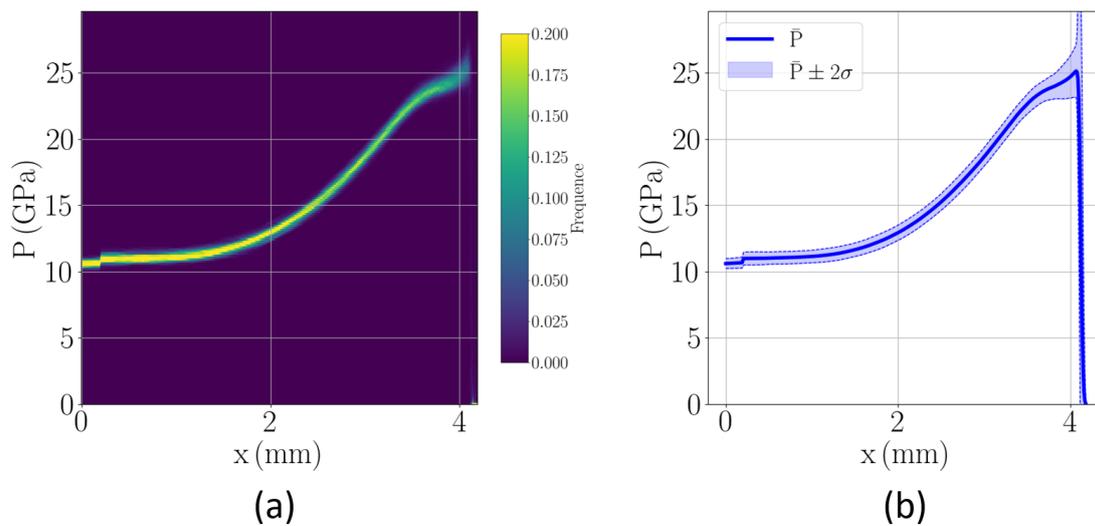


FIGURE 9.3 – (a) Carte de couleur représentant l'évolution de la distribution de pression en fonction de la position, à un instant fixé. À position x et pression P données, la carte de couleur indique la fréquence à laquelle la pression P apparaît dans les mailles situées à la position x . (b) Évolution spatiale de la pression moyenne (pour une moyenne arithmétique) et de son intervalle de confiance. La simulation exploitée a été réalisée avec une microstructure de diamètre équivalent moyen $\bar{d}_{eq} = 162 \mu\text{m}$, une vitesse de déflagration $D_f = 1000 \text{ m s}^{-1}$ et avec une vitesse d'impact $v_i = 832 \text{ m s}^{-1}$.

9.4 Extraction du diagramme de marche

Le domaine étant bidimensionnel, la position du choc est définie par $x_c = x_c(y, t)$. Afin de déterminer le diagramme de marche, la position de l'onde de choc est détectée par une opération de seuillage sur la pression à chaque instant t de la simulation, puis moyennée selon y avec une moyenne arithmétique. La vitesse moyenne du choc est ensuite obtenue par dérivation temporelle de sa position moyenne $\bar{x}_c(t) = \frac{1}{N} \sum_{i=0}^{N(t)} x_c(y_i, t)$, avec $N(t)$ correspondant au nombre de mailles dans la zone d'intérêt à l'instant t et selon l'axe \vec{x} . La figure 9.4 présente le diagramme de marche ainsi que l'évolution spatiale de la vitesse de choc obtenue à l'issue d'une simulation.

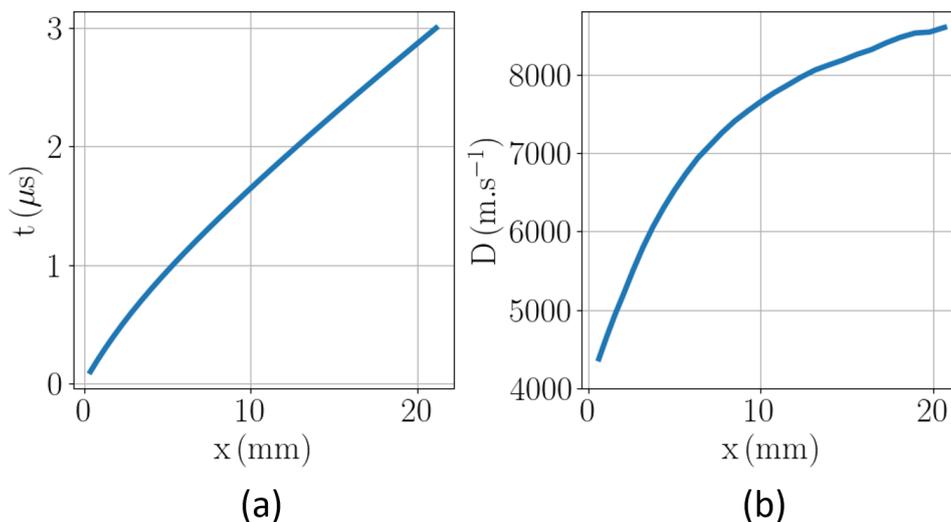


FIGURE 9.4 – Illustration (a) du diagramme de marche et (b) de l'évolution spatiale de la vitesse de choc obtenus à l'issue d'une simulation. La simulation exploitée a été réalisée avec une microstructure de diamètre équivalent moyen $\overline{d_{eq}} = 162 \mu\text{m}$, une vitesse de déflagration $D_f = 100 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ et avec une vitesse d'impact $v_i = 832 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$.

Troisième partie

Simulations

Simulations réalisées à vitesse de déflagration constante

Sommaire

10.1	Phénoménologie des simulations	153
10.2	Influence de la vitesse de déflagration et de la microstructure	158
10.3	Courbe unique de transition	160
10.4	Relations d'équivalence entre microstructures	161
10.5	Comparaison des simulations mésoscopiques avec le Pop-Plot expérimental	163
10.6	Synthèse	164

Les premières simulations de TCD à l'échelle mésoscopique ont été réalisées avec des vitesses de déflagration constantes et des microstructures monomodales. Cette approche simple est néanmoins intéressante afin de déterminer si les simulations mésoscopiques permettent la transition d'un choc en détonation dans cette configuration. Pour cela, les simulations seront comparées au Pop-Plot expérimental du HMX comprimé.

10.1 Phénoménologie des simulations

Dans cette première partie, nous proposons d'explorer la phénoménologie de la TCD. C'est une première étape afin de mieux comprendre comment les réactions chimiques participent à l'accélération du choc.

La microstructure employée dans cette étude a un diamètre équivalent moyen $\overline{d_{eq}}$ de 162 μm . C'est une microstructure plus grossière que celles mesurées par Burnside *et al.* [129]. Néanmoins, ce sont des caractéristiques morphologiques raisonnables pour de nombreux explosifs [27, 149-151]. Dans la littérature, des propriétés morphologiques semblables sont généralement employées pour étudier la TCD des explosifs à l'échelle mésoscopique [106].

À partir de cette microstructure, une simulation mésoscopique de test du coin a été réalisée avec une vitesse d'impact $v_i = 800 \text{ m s}^{-1}$ et une vitesse de déflagration de $D_f = 100 \text{ m s}^{-1}$.

La figure 10.1 illustre les champs de fraction brûlée à quatre instants de la simulation. L'évolution spatiale de la fraction brûlée moyenne à ces instants est également présentée. Afin de bien

distinguer les grains de HMX durant la combustion, seule une zone de $3\text{ mm} \times 3\text{ mm}$ après le front de choc est présentée.

Aux premiers instants après l'impact ($t = 0.15\ \mu\text{s}$), les grains proches du projectile ne sont pas entièrement brûlés. Sur le profil moyen de fraction brûlée, un pic à l'interface entre les grains et l'impacteur est observé. Cela est dû au fait qu'à l'interface entre le projectile et le coin, les cristaux ont tous une frontière verticale qui est amorcée par l'onde de choc. On a donc un front de déflagration qui se propage horizontalement dans les grains en contact avec l'impacteur, ce qui transparait dans le calcul de la moyenne. À partir de $t = 0.15\ \mu\text{s}$, l'onde de choc s'est propagée et s'est éloignée de l'impacteur. On peut alors voir que les grains sont entièrement consommés par le front de déflagration à distance du choc. Au cours du temps, l'épaisseur de la zone de réaction tend ensuite à diminuer mais conserve une valeur proche de 3.0 mm (figure 10.1.b).

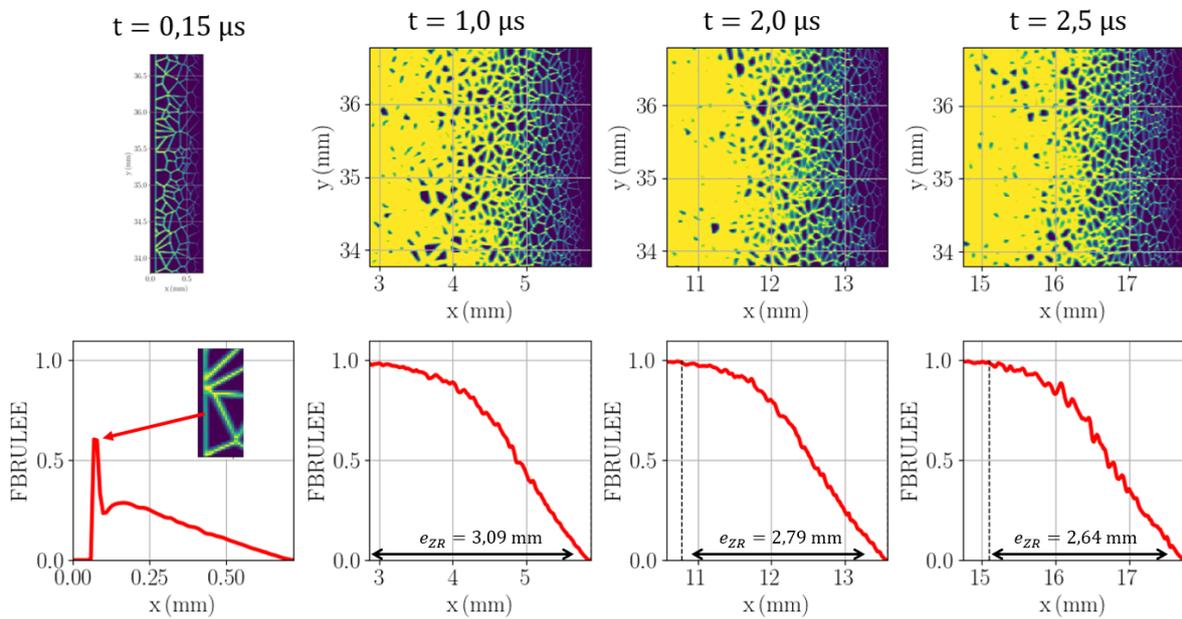


FIGURE 10.1 – Illustration du champ de fraction brûlée à proximité de l'onde de choc, pour une simulation réalisée avec une vitesse de déflagration $D_f = 100\text{ m s}^{-1}$.

L'évolution spatiale de la pression moyenne et son intervalle de confiance sont tracés à cinq instants de la simulation sur la figure 10.2. Au début de la propagation du choc ($t < 0.5\ \mu\text{s}$), les réactions chimiques dans l'explosif participent à l'augmentation de la pression du choc mais également à l'augmentation de la pression dans tout l'écoulement aval. Aux alentours de $t = 0.5\ \mu\text{s}$, la pression finit par se stabiliser à une valeur constante à proximité de l'impacteur. À partir de cet instant, l'augmentation de la pression au cours du temps est principalement observée à proximité du front de choc. Au dernier pas de temps, *i.e.* à $t = 2.5\ \mu\text{s}$, la pression au front de choc a encore augmenté. L'état stationnaire n'est donc pas encore atteint.

Tout au long de la simulation, on peut voir que l'intervalle de confiance associé à la pression est très resserré. Le champ de pression peut être considéré comme *quasi* uniforme dans la dimension transverse. Le temps de relaxation de la pression est donc suffisamment faible pour que les fluctuations induites par les réactions chimiques s'équilibrent. On observe néanmoins une dispersion statistique plus marquée au niveau du front de choc. Cette dispersion est principalement localisée à la phase de montée en pression dans l'explosif et pourrait provenir du fait que le front de choc est légèrement plissé par les réactions chimiques dans l'explosif.

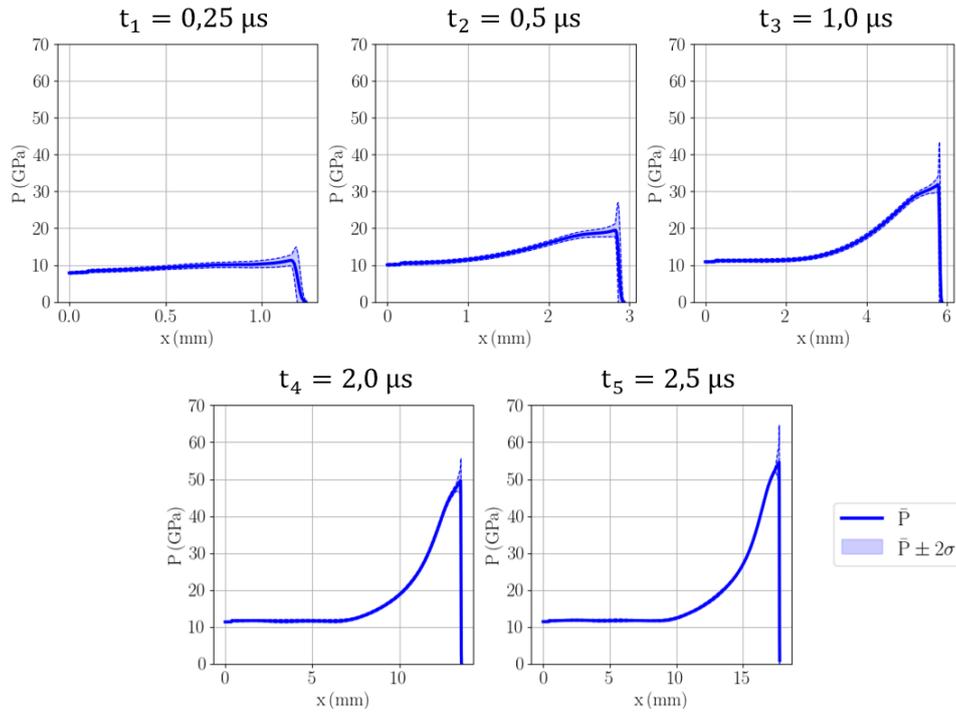


FIGURE 10.2 – Évolution spatiale de la pression moyenne et de son intervalle de confiance à différents instants. La microstructure a un diamètre équivalent moyen de $\bar{d}_{eq} = 162 \mu\text{m}$ et une vitesse de déflagration $D_f = 100 \text{ m s}^{-1}$ est employée. La vitesse d'impact est de $v_i = 800 \text{ m s}^{-1}$.

L'évolution temporelle de la vitesse du choc est tracée sur la figure 10.3. Les temps associés à la figure 10.2 ont été replacés sur ce graphique. On peut ainsi voir que, tout au long de sa propagation, la vitesse du choc augmente. Son accélération est en revanche plus marquée aux premiers instants après l'impact et tend ensuite à diminuer. À la fin de la simulation, l'onde de choc n'a pas encore atteint la vitesse de détonation stationnaire D_{CJ} .

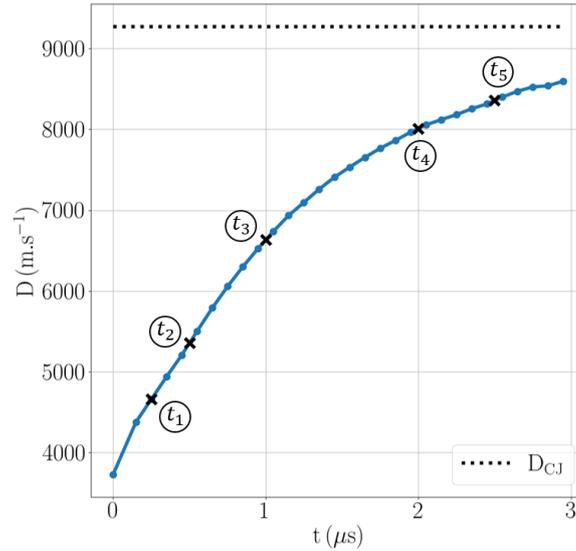


FIGURE 10.3 – Évolution spatiale de la vitesse du choc lors de la TCD, pour une microstructure avec un diamètre équivalent moyen de $\bar{d}_{eq} = 162 \mu\text{m}$ et une vitesse de déflagration $D_f = 100 \text{ m s}^{-1}$. La vitesse d'impact est de $v_i = 800 \text{ m s}^{-1}$. Les temps choisis pour la figure 10.2 sont notés.

Une simulation du test du coin a ensuite été réalisée avec la même microstructure et la même vitesse d'impact, mais avec une vitesse de déflagration de $D_f = 1000 \text{ m s}^{-1}$. La figure 10.4 illustre les champs de fraction brûlée dans un rectangle de $3 \text{ mm} \times 3 \text{ mm}$ après le front de choc. L'évolution spatiale de la fraction brûlée moyenne à ces quatre instants est également présentée. On observe une phénoménologie similaire à celle obtenue avec $D_f = 100 \text{ m s}^{-1}$, à savoir qu'un pic de fraction brûlée est observé à l'interface entre l'impacteur et l'explosif. De même, l'épaisseur de la zone tend à diminuer au cours de la simulation, bien que sa valeur reste proche de 0.3 mm .

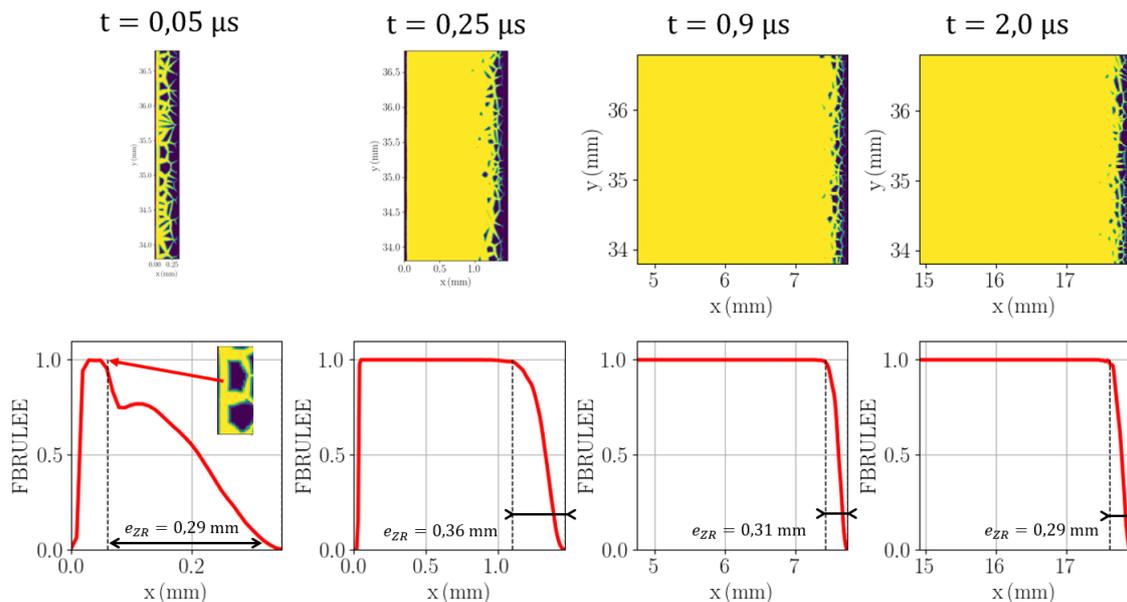


FIGURE 10.4 – Illustration du champ de fraction brûlée à proximité de l'onde de choc, pour une simulation réalisée avec une vitesse de déflagration $D_f = 1000 \text{ m s}^{-1}$.

L'évolution spatiale de la pression moyenne et son intervalle de confiance à cinq instants de la simulation sont tracés sur la figure 10.5. Dès les premiers instants suivant l'impact (à $t = 0.1 \mu\text{s}$), les réactions chimiques dans l'explosif contribuent déjà à l'augmentation de la pression dans l'écoulement. Cette augmentation se poursuit jusqu'à $t = 0.5 \mu\text{s}$. À partir de $t = 0.9 \mu\text{s}$, le profil de pression induit par le choc semble avoir atteint un régime *quasi* stationnaire. Au début de la simulation, la pression dans l'écoulement présente une dispersion assez marquée dans la dimension transverse. Le champ de pression est alors hétérogène. Néanmoins, au fur et à mesure que le choc se propage, cette dispersion tend à diminuer. Le champ de pression tend à s'uniformiser au cours de la TCD par relaxation acoustique.

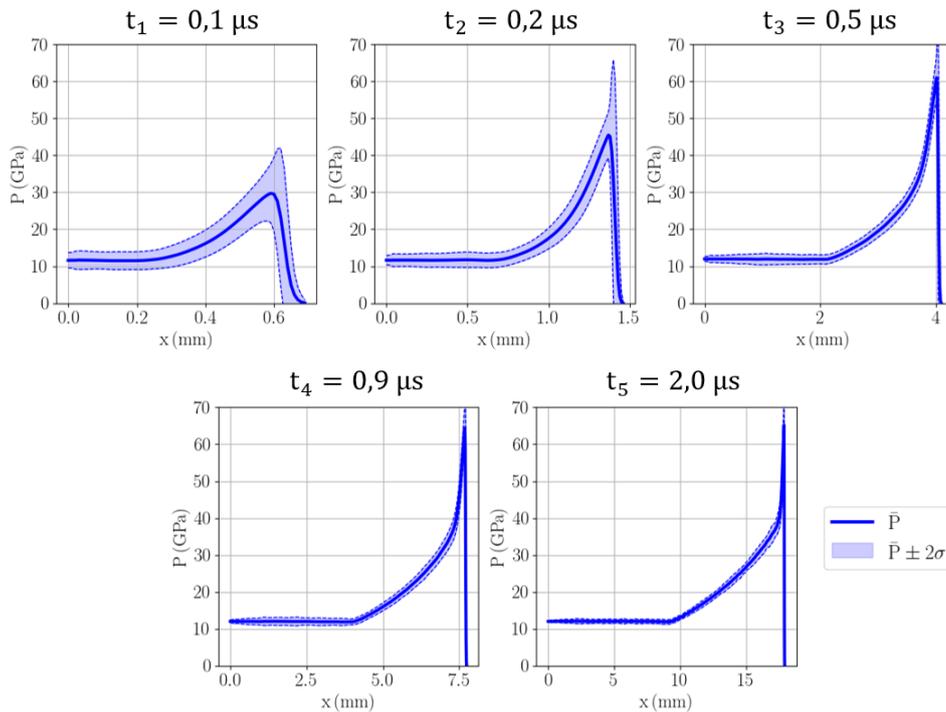


FIGURE 10.5 – Évolution spatiale de la pression moyenne et de son intervalle de confiance à différents instants. La microstructure a un diamètre équivalent moyen de $\overline{d_{eq}} = 162 \mu\text{m}$ et une vitesse de déflagration $D_f = 1000 \text{ m s}^{-1}$ est employée. La vitesse d'impact est de $v_i = 800 \text{ m s}^{-1}$.

Sur la figure 10.6, l'évolution temporelle de la vitesse du choc est tracée ainsi que les temps associés à la figure 10.5. On peut ainsi observer qu'aux premiers instants qui suivent l'impact de la plaque d'aluminium, le choc accélère brusquement dans l'explosif. Cette accélération diminue au cours du temps jusqu'à devenir nulle lorsque la vitesse du choc atteint la vitesse de détonation établie D_{CJ} . Cette convergence de la vitesse de choc vers D_{CJ} est attendue : en régime établi, la vitesse du choc est déterminée par les équations d'état et la cinétique de l'explosif n'influence que l'écoulement aval au front de choc.

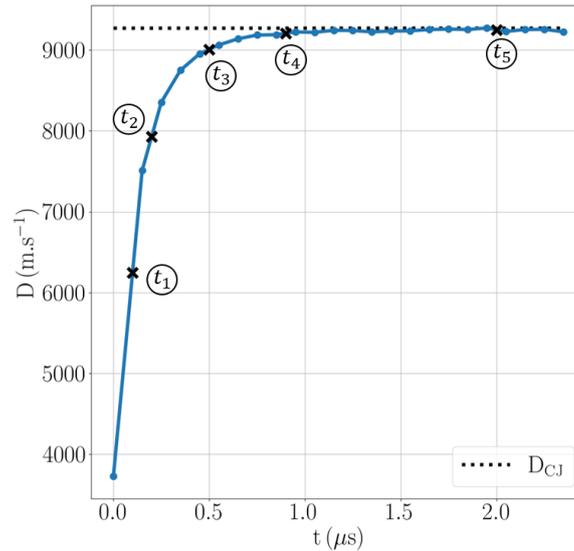


FIGURE 10.6 – Évolution spatiale de la vitesse du choc lors de la TCD, pour une microstructure avec un diamètre équivalent moyen de $\overline{d_{eq}} = 162 \mu\text{m}$ et une vitesse de déflagration $D_f = 1000 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$. La vitesse d'impact est de $v_i = 800 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$. Les temps choisis pour la figure 10.5 sont notés.

10.2 Influence de la vitesse de déflagration et de la microstructure

Le modèle réactif employé dans les simulations numériques s'exprime : $\dot{\lambda} = (S/V_0)D_f$. La cinétique de l'explosif est donc entièrement déterminée par la vitesse de déflagration du HMX et par la microstructure au travers du rapport S/V_0 . Dans un premier temps, l'influence de la vitesse de déflagration du HMX sur l'évolution de la vitesse du choc est étudiée. L'influence de la microstructure sera analysée dans un second temps.

Les premières simulations ont été réalisées avec une microstructure à $\overline{d_{eq}} = 162 \mu\text{m}$ et des vitesses de déflagration D_f allant de $5 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ à $1400 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$. La vitesse d'impact est fixée à $800 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$. Les résultats sont présentés sur la figure 10.7. Naturellement, plus la vitesse de déflagration est élevée, plus la vitesse du choc réactif augmente rapidement. Pour des vitesses de déflagration supérieures à $400 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$, la vitesse du choc atteint la vitesse de détonation stationnaire théorique D_{CJ} dans les dimensions considérées. En deçà de $400 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$, l'accélération induite par les réactions chimiques n'est pas suffisante pour que le choc atteigne la vitesse de détonation stationnaire dans les dimensions utilisées.

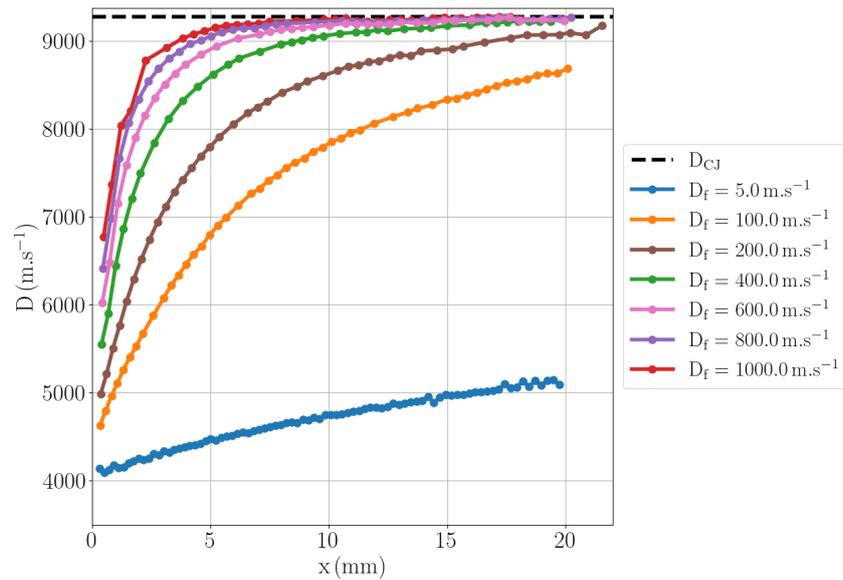


FIGURE 10.7 – Évolution spatiale de la vitesse du choc obtenue par simulation pour différentes vitesses de déflagration avec une vitesse d'impact $v_i = 800 \text{ m s}^{-1}$ et une microstructure de diamètre équivalent moyen $\overline{d_{eq}} = 162 \text{ }\mu\text{m}$.

Afin de déterminer l'influence du diamètre moyen des grains sur l'évolution temporelle de la vitesse du choc, quatre microstructures ont été générées avec un diamètre moyen compris entre $162 \text{ }\mu\text{m}$ et $545 \text{ }\mu\text{m}$. Des simulations ont ensuite été effectuées avec une vitesse d'impact de 800 m s^{-1} et des vitesses de déflagration D_f de 100 m s^{-1} et 1000 m s^{-1} . Les résultats sont présentés sur la figure 10.8. Comme attendu, pour les deux vitesses de déflagration considérées, la réduction du diamètre équivalent moyen engendre une augmentation de l'accélération de l'onde de choc. Cela s'explique par le fait que la réduction de la taille des grains dans la microstructure s'accompagne d'une augmentation du rapport S/V ce qui se traduit par une réactivité globale plus rapide, et donc une accélération de l'onde de choc plus marquée.

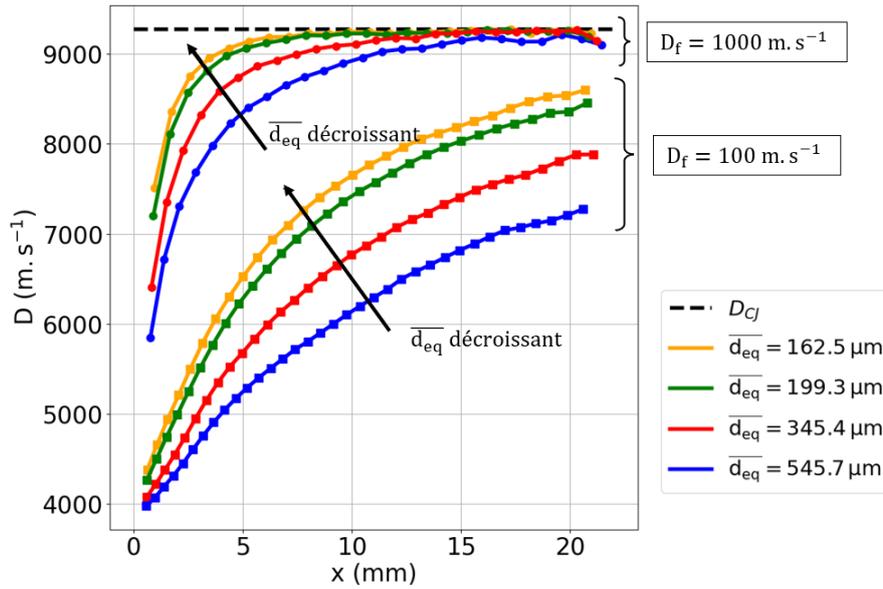


FIGURE 10.8 – Évolution spatiale de la vitesse du choc pour différentes microstructures à $v_i = 800 \text{ m.s}^{-1}$ pour deux vitesses de déflagration : $D_f = 100 \text{ m.s}^{-1}$ (carrées) et $D_f = 1000 \text{ m.s}^{-1}$ (disques)

10.3 Courbe unique de transition

Dans le but de déterminer si l'hypothèse de courbe unique de transition est vérifiée en approche mésoscopique, plusieurs simulations de test du coin ont été réalisées, pour différentes vitesses d'impact v_i . La microstructure avec un diamètre équivalent moyen $\overline{d_{eq}} = 162 \mu\text{m}$ est employée, pour deux vitesses de déflagration $D_f = 100 \text{ m.s}^{-1}$ et $D_f = 1000 \text{ m.s}^{-1}$. Pour chaque simulation, l'évolution de la vitesse du choc en fonction du temps a été déterminée. En alignant arbitrairement les profils de vitesse de choc obtenus dans un référentiel tel que $D(x = 0 \text{ mm}) = 8000 \text{ m.s}^{-1}$, on constate qu'ils suivent tous la même évolution (figure 10.9). Pour les deux vitesses de déflagration considérées, l'hypothèse de courbe unique de transition est observée.

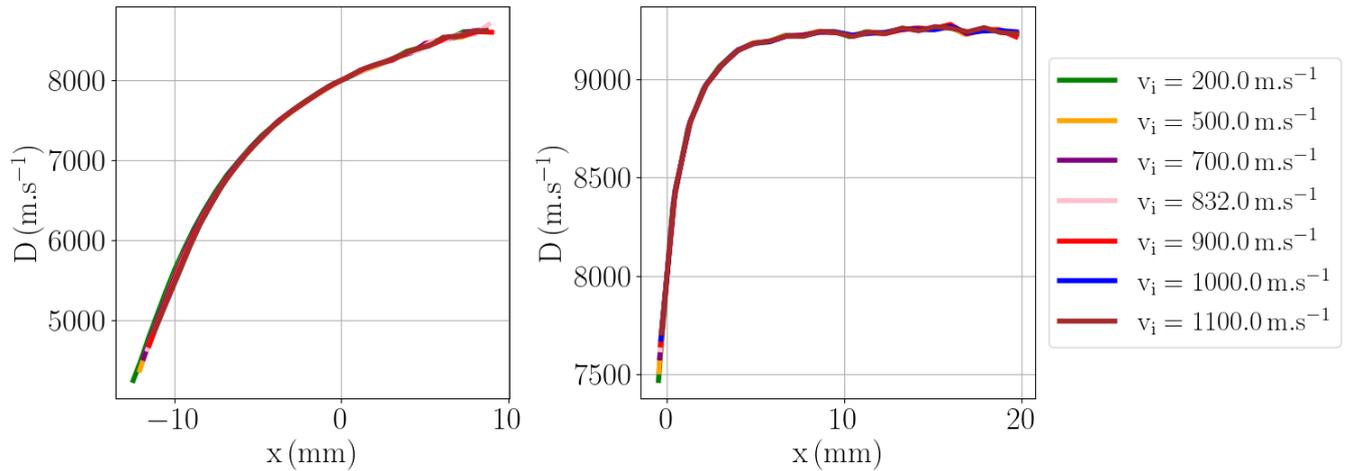


FIGURE 10.9 – Évolution spatiale de la vitesse du choc à différentes vitesses d'impact pour des vitesses de déflagration $D_f = 100 \text{ m s}^{-1}$ (gauche) et $D_f = 1000 \text{ m s}^{-1}$ (droite). Les profils sont obtenus pour une microstructure de diamètre moyen $\bar{d}_{eq} = 162 \mu\text{m}$ et sont recalés arbitrairement afin que $D(x = 0 \text{ mm}) = 8000 \text{ m s}^{-1}$.

Avec le modèle de combustion en surface des grains, une microstructure monomodale et une vitesse de déflagration constante, l'hypothèse de courbe unique semble valide. Cela signifie que les résultats concernant l'influence de la vitesse de déflagration et de la microstructure sur l'évolution de la vitesse de choc (présentés en section 10.2) sont valables quelle que soit la vitesse d'impact. De plus, la vérification de cette hypothèse permet de tracer le Pop-Plot dans le plan (x, D) (voir section 3.4.2).

10.4 Relations d'équivalence entre microstructures

Comme présenté en section 10.2, l'accélération de l'onde de choc lors de la TCD est pilotée non seulement par la vitesse de déflagration des cristaux énergétiques mais aussi par la microstructure de l'explosif. Par conséquent, l'étude de la TCD du HMX comprimé doit être réalisée en respectant les propriétés morphologiques de la microstructure réelle (voir section 6.4). Pour des simulations numériques, l'utilisation d'une telle microstructure nécessite cependant un maillage très fin entraînant des temps de calcul prohibitifs. L'objectif de cette section est de développer une stratégie permettant d'étudier la TCD sur une microstructure grossière.

Dans le modèle réactif de régression de surface, l'expression de la vitesse de réaction est : $\dot{\lambda} = (S/V_0)D_f$. Cette expression suggère qu'en utilisant deux microstructures aux propriétés morphologiques différentes, il est possible d'obtenir des résultats similaires en corrigeant la vitesse de déflagration pour contre-balancer la différence de surface réactive. À titre d'exemple, considérons deux microstructures, indicées 1 et 2, dont les facteurs de forme associés sont respectivement $(S_0/V_0)_1$ et $(S_0/V_0)_2$, avec $(S_0/V_0)_1 > (S_0/V_0)_2$. La microstructure 1 est associée à une vitesse de déflagration D_{f1} .

Pour compenser la différence en termes de surface réactive, la vitesse de déflagration D_{f2} de la microstructure 2 est déterminée grâce à la relation suivante :

$$D_{f2} = \frac{(S_0/V_0)_1}{(S_0/V_0)_2} D_{f1} \quad (10.1)$$

Ainsi, il serait possible d'employer une microstructure grossière et de transposer le jeu de paramètres obtenu à une microstructure représentative. Dans la suite du manuscrit, nous emploierons le terme de relation d'équivalence en se référant à la relation 10.1.

Afin de vérifier la validité de cette démarche, une microstructure avec un facteur de forme $(S_0/V_0)_1 = 30.6 \text{ mm}^{-1}$ et une vitesse de déflagration $D_{f,1} = 200 \text{ m s}^{-1}$ est prise comme référence. Deux autres microstructures ont ensuite été générées, avec un facteur de forme $(S_0/V_0)_2 = 14.4 \text{ mm}^{-1}$ et $(S_0/V_0)_3 = 10.2 \text{ mm}^{-1}$. Leurs vitesses de déflagration $D_{f,2} = 424.3 \text{ m s}^{-1}$ et $D_{f,3} = 589.6 \text{ m s}^{-1}$ ont été calculées avec la relation d'équivalence à partir de la vitesse de déflagration $D_{f,1}$.

Les résultats de ces simulations numériques, réalisées avec une vitesse d'impact de 200 m s^{-1} , sont présentés en Figure 10.10. Une très bonne correspondance entre les différentes évolutions de vitesse de choc pour les différentes microstructures est constatée. Ces résultats permettent de valider la méthodologie proposée.

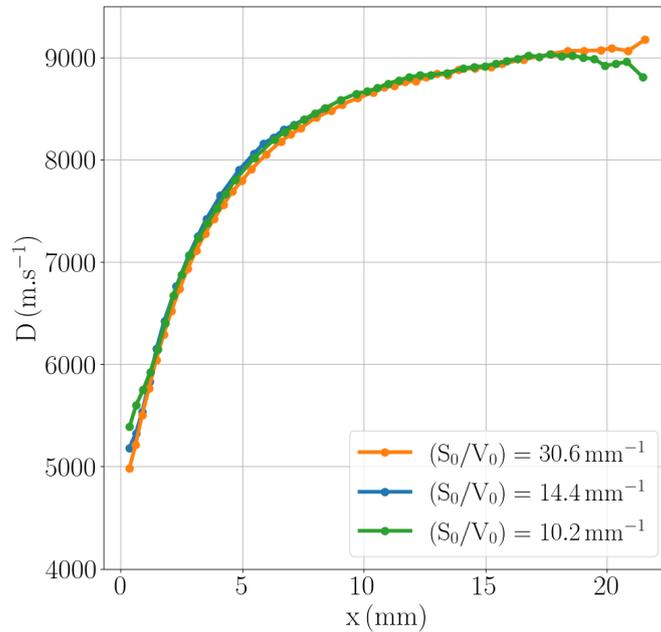


FIGURE 10.10 – Évolution spatiale de la vitesse du choc pour trois microstructures pour des vitesses de déflagration constantes. La microstructure à $162 \mu\text{m}$ a été prise comme référence pour déterminer la vitesse de déflagration des deux autres microstructures.

10.5 Comparaison des simulations mésoscopiques avec le Pop-Plot expérimental

Dans la section 10.3, nous avons montré que l'hypothèse de courbe unique est vérifiée avec une vitesse de déflagration constante. Par conséquent, le Pop-Plot peut être obtenu à partir d'une seule simulation à une vitesse d'impact donnée. Nous avons également montré dans le chapitre 3 que, sous hypothèse de courbe unique, l'évolution spatiale de la vitesse du choc et le Pop-Plot contiennent les mêmes informations. Par conséquent, la comparaison du Pop-Plot expérimental avec les résultats des simulations est réalisée dans le plan (x, D) . La figure 10.11 regroupe les résultats des simulations de la figure 10.8 auxquels ont été ajoutés le Pop-Plot expérimental du HMX comprimé.

Des différences importantes peuvent être observées entre les profils de vitesse de choc obtenus *via* les simulations numériques et les données expérimentales. Pour les deux vitesses de déflagration employées, l'accélération de l'onde de choc obtenue par la simulation est plus marquée que celle obtenue avec le Pop-Plot expérimental. De plus, tous les profils issus des simulations suivent un profil proche d'une fonction de type $f : x \rightarrow 1 - e^{-x}$, contrairement au Pop-Plot qui dénote d'une évolution sous la forme d'une exponentielle. Pour la vitesse de déflagration de 100 m s^{-1} , les évolutions de vitesse du choc sont les plus proches du Pop-Plot mais la convexité de la courbe est inversée. Cependant, aucun des profils n'atteint la vitesse de détonation établie D_{CJ} dans les dimensions du coin. Pour la vitesse de déflagration de 1000 m s^{-1} , les évolutions de vitesse de choc divergent fortement du Pop-Plot bien que la vitesse de détonation établie D_{CJ} soit atteinte dans les dimensions du coin.

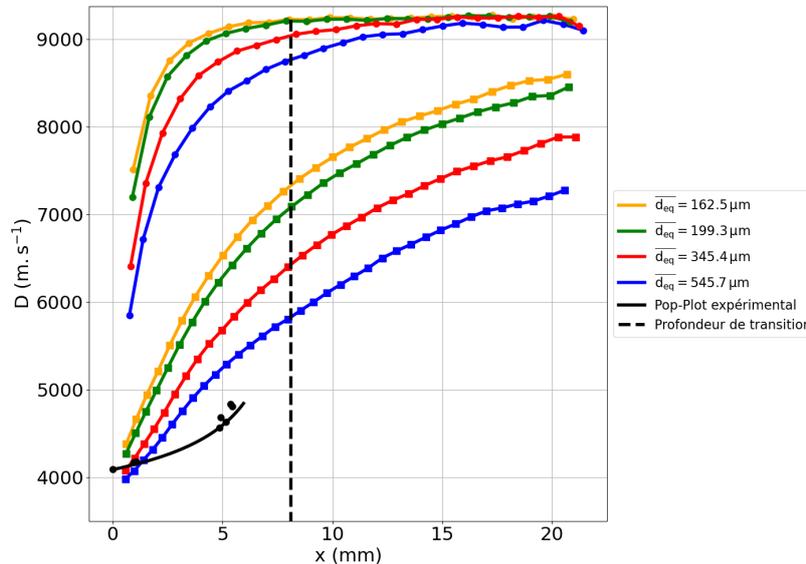


FIGURE 10.11 – Comparaison de l'évolution spatiale de la vitesse du choc pour différentes microstructures à $v_i = 800 \text{ m s}^{-1}$ pour deux vitesses de déflagration : $D_f = 100 \text{ m s}^{-1}$ (carrés) et $D_f = 1000 \text{ m s}^{-1}$ (disques) avec le Pop-Plot expérimental du HMX comprimé [128].

La figure 10.11 montre que le modèle de combustion en surface des grains, employé avec une vitesse de déflagration constante et une distribution monomodale, n'est pas adapté pour restituer le Pop-Plot expérimental du HMX comprimé bien qu'il permette d'observer un phénomène de TCD.

10.6 Synthèse

Au cours de ce chapitre, les premières simulations de test du coin réalisées à l'échelle mésoscopique avec une vitesse de déflagration constante et des microstructures monomodales ont été présentées. Cette étude préliminaire permet de disposer d'un cadre simplifié pour étudier la contribution de la déflagration des cristaux de HMX à l'accélération du choc au cours de la TCD.

Dans un premier temps, nous avons étudié la phénoménologie de la TCD sur une microstructure grossière avec le modèle réactif de régression de surface, pour deux vitesses de déflagration. Pour les deux vitesses de déflagration employées, l'épaisseur de la zone de réaction tend à diminuer au cours de la TCD, bien que légèrement. Dans ces deux configurations, l'accélération du choc est plus marquée aux premiers instants suivant l'impact. Elle diminue ensuite progressivement lorsque la vitesse du choc augmente et se rapproche de D_{CJ} . Pour une vitesse de déflagration élevée, le champ de pression est hétérogène au début de la TCD et s'uniformise dans la direction transverse à mesure que le choc se propage. Pour une vitesse de déflagration faible, la pression reste uniforme dans la direction transverse tout au long de la TCD.

L'influence de la granulométrie et de la vitesse de déflagration sur l'évolution de la vitesse du choc a ensuite été étudiée. Avec ces simulations, nous avons pu voir que plus la vitesse de déflagration est importante, plus l'accélération de l'onde de choc est marquée. Pour des vitesses de déflagration élevée, la vitesse de détonation stationnaire D_{CJ} est atteinte dans les dimensions du coin. Comme attendu, l'accélération induite par les réactions chimiques est également plus importante pour des microstructures avec une granulométrie fine que pour celles avec des granulométries grossières. Une relation d'équivalence entre microstructures a également été identifiée afin d'obtenir une évolution du choc similaire ($D_f S_0 / V_0 \approx \text{constante}$).

L'objectif était de comparer le résultat des simulations au Pop-Plot du HMX comprimé afin de juger de la pertinence du modèle réactif employé. Dans un premier temps, il a donc été montré que l'hypothèse de courbe unique de transition était validée. Ce résultat implique que le Pop-Plot et l'évolution spatiale de la vitesse de choc contiennent les mêmes informations. Cependant, en comparant le Pop-Plot expérimental dans le plan (x, D) aux résultats des simulations, nous avons montré que le modèle réactif de régression de surface, employé avec une vitesse de déflagration constante, ne permettait pas de modéliser correctement la TCD du HMX comprimé.

Pour mieux restituer la TCD du HMX comprimé, il est donc nécessaire d'employer une modélisation plus complexe de la vitesse de déflagration. En effet, les données de la littérature montrent que la vitesse de déflagration du HMX est fortement dépendante de la pression. De plus, le modèle réactif employé ne tient pas compte de l'endommagement des cristaux qui serait induit par l'onde de choc et qui serait responsable d'une augmentation de la surface des cristaux énergétiques. Dans la suite de ce manuscrit, nous nous focaliserons sur l'utilisation d'une vitesse de déflagration dépendante de la pression.

Simulations avec une vitesse de déflagration dépendante de la pression

Sommaire

11.1 Simulations réalisées avec les données de la littérature	168
11.2 Phénoménologie observée dans les simulations	171
11.3 Détermination d'un premier jeu de paramètres pour la vitesse de déflagration du HMX	179
11.4 Passage à une microstructure représentative	184
11.5 Comparaison aux données expérimentales	186
11.6 Influence de la microstructure sur la TCD de l'explosif	189
11.7 Retour sur l'hypothèse de courbe unique	191
11.8 Synthèse	193

L'objectif de cette partie est d'identifier une expression de la vitesse de déflagration permettant de restituer le Pop-Plot expérimental par simulation numérique. Dans la littérature, les mesures de vitesse de déflagration réalisées sur des cristaux de HMX en bombe manométrique montrent une dépendance à la pression (section 7.3). L'expression employée pour la vitesse de déflagration est :

$$D_f = a + (b - a) \left(\frac{P}{P_{ref}} \right)^n \quad \text{si } P > P_{seuil} \quad (11.1)$$

Les mesures de déflagration de cristaux de HMX réalisées par Boggs *et al.* [16] suggèrent que la vitesse de déflagration tend vers 0 m s^{-1} lorsque la pression tend vers une valeur nulle. Par conséquent, il a été décidé de fixer $a = 0 \text{ m s}^{-1}$. La pression de référence P_{ref} a été définie comme égale à $P_{CJ} = 36.6 \text{ GPa}$ et la pression seuil est fixée à 0.2 GPa . Par conséquent, le paramètre b correspond à la vitesse de déflagration à P_{CJ} . La vitesse de déflagration employée dans les simulations devient donc :

$$D_f = b \left(\frac{P}{P_{CJ}} \right)^n \quad \text{si } P > P_{seuil} \quad (11.2)$$

Dans ce chapitre, nous supposerons initialement que les microstructures employées sont représentatives et que l’hypothèse de courbe unique est vérifiée. Les sections 11.6 et 11.7 et ont pour objectif de vérifier la validité de ces hypothèses pour une vitesse de déflagration dépendante de la pression.

Sauf mention contraire, le maillage employé est de 10 μm afin d’éviter des temps de calcul trop importants lors des simulations. Ce choix a été réalisé afin de garantir une dizaine de mailles dans les grains. Une telle résolution ne permet cependant pas d’atteindre la convergence du maillage (voir annexe D). Ce chapitre a donc pour vocation de présenter une étude de faisabilité et de développer une méthodologie de travail en approche mésoscopique.

11.1 Simulations réalisées avec les données de la littérature

Comme nous avons pu le voir dans la section 7.3, des mesures de déflagration réalisées sur des cristaux de HMX sont disponibles dans la littérature, mais celles-ci ont été obtenues pour des pressions faibles par rapport à celles rencontrées lors de la TCD. Pour des pressions caractéristiques de la TCD, les mesures sont réalisées à partir de poudre de HMX et sont donc davantage représentatives d’un comportement macroscopique que de celui d’un cristal seul. Le choix d’une vitesse de déflagration pour le HMX se révèle alors délicat. L’utilisation de la vitesse de déflagration obtenue pour des cristaux de HMX implique d’extrapoler des mesures réalisées à quelques centaines de MPa à des pressions de plusieurs dizaines de GPa. A contrario, l’emploi des mesures réalisées sur des poudres de HMX revient à assimiler le comportement macroscopique des poudres à celui des cristaux.

Afin de déterminer l’approche la plus pertinente à la modélisation de la TCD, les simulations seront réalisées avec les vitesses de déflagration issues de Boggs *et al.* [16], Atwood *et al.* [140] et Esposito *et al.* [17]. Nos simulations étant bidimensionnelles, nous devons d’abord les adapter afin de prendre en compte des effets dimensionnels. En effet, pour une configuration 3D, le facteur de forme (S_0/V_0) est plus important que pour une configuration 2D plan. À titre d’exemple, les facteurs de forme d’une sphère et d’un cercle sont liés par :

$$\frac{(S_0/V_0)_{3D}}{(S_0/V_0)_{2D}} = \frac{3}{2} \tag{11.3}$$

En supposant que les propriétés morphologiques de notre microstructure sont uniformes et en assimilant les grains à des disques, on peut obtenir en 2D une approximation de la vitesse de déflagration 3D en choisissant :

$$D_{f,2D}(P) = \frac{3}{2} D_{f,3D} \tag{11.4}$$

Ce qui nous donne :

$$D_{f,2D}(P) = b_{2D} \left(\frac{P}{P_{CJ}} \right)^{n_{2D}} \quad (11.5)$$

avec $b_{2D} = \frac{3}{2}b_{3D}$ et $n_{3D} = n_{2D}$.

Une fois ces transformations réalisées, il est possible d'employer les jeux de paramètres issus de la littérature pour les simulations. Ceux-ci sont présentés en table 11.1 et illustrés en figure 11.1.

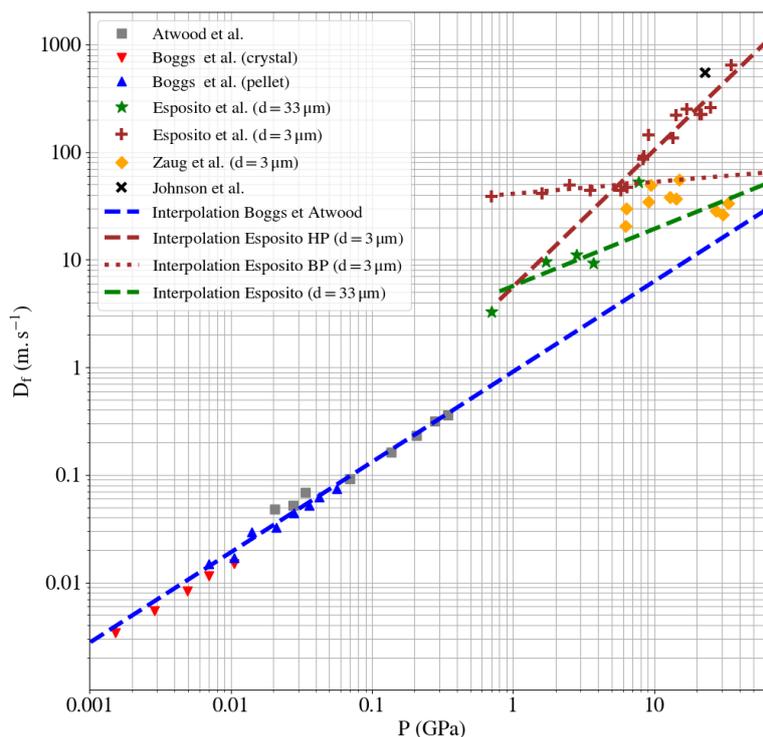


FIGURE 11.1 – Illustration des régressions réalisées à partir des mesures de vitesse de déflagration disponibles dans la littérature.

TABLE 11.1 – Paramètres pour la vitesse de déflagration du HMX obtenus *via* la régression des données de la littérature, après adaptation pour des configurations 2D.

Références	Boggs <i>et al.</i> [16] Atwood <i>et al.</i> [140]	Esposito <i>et al.</i> [17] BP ^a ($d = 3 \mu\text{m}$)	Esposito <i>et al.</i> [17] HP ^b ($d = 3 \mu\text{m}$)	Esposito <i>et al.</i> [17] ($d = 33 \mu\text{m}$)
D_f (3D)	$b_{3D} = 18.7 \text{ m s}^{-1}$ $n_{3D} = 0.84$	$b_{3D} = 60.92 \text{ m s}^{-1}$ $n_{3D} = 0.11$	$b_{3D} = 541.76 \text{ m s}^{-1}$ $n_{3D} = 1.27$	$b_{3D} = 38.42 \text{ m s}^{-1}$ $n_{3D} = 0.53$
D_f (2D)	$b_{2D} = 28.1 \text{ m s}^{-1}$ $n_{2D} = 0.84$	$b_{2D} = 91.38 \text{ m s}^{-1}$ $n_{2D} = 0.11$	$b_{2D} = 812.64 \text{ m s}^{-1}$ $n_{2D} = 1.27$	$b_{2D} = 57.63 \text{ m s}^{-1}$ $n_{2D} = 0.53$

a. Basse Pression

b. Haute Pression

Ces jeux de paramètres ont été employés pour réaliser des simulations mésoscopiques. Dans

ces simulations, l'impacteur a une vitesse initiale de 800 m s^{-1} . Cette vitesse a été choisie afin d'atteindre une pression d'impact proche de celles du Pop-Plot du HMX comprimé. Afin d'éviter des simulations trop coûteuses en temps de calcul, une microstructure grossière d'un diamètre équivalent moyen de $162 \mu\text{m}$ est employée. Le passage à une microstructure représentative sera abordé en section 11.4.

L'évolution de la vitesse du choc au cours de sa propagation dans le coin est tracée en figure 11.2. Sur cette figure, le Pop-Plot du HMX comprimé est également tracé. Parmi les paramètres considérés pour la loi de vitesse de déflagration, seuls ceux issus d'Atwood *et al.* [140] et de Boggs *et al.* [16] permettent d'approcher le Pop-Plot du HMX comprimé. Cependant, l'onde de choc n'atteint jamais D_{CJ} dans les dimensions du coin, et le critère de transition issu du Pop-Plot expérimental n'est pas respecté. Quant aux vitesses de déflagration issues de l'étude d'Esposito *et al.* [17], elles surestiment fortement la vitesse de l'onde de choc par rapport à celle mesurée avec le Pop-Plot expérimental. Pour tous les jeux de paramètres considérés, hormis celui issu des travaux d'Esposito *et al.* [17] ($33 \mu\text{m}$), la convexité des courbes est inversée par rapport à celle du Pop-Plot expérimental. Les jeux de paramètres issus de la littérature ne permettent donc pas de modéliser la TCD du HMX comprimé.

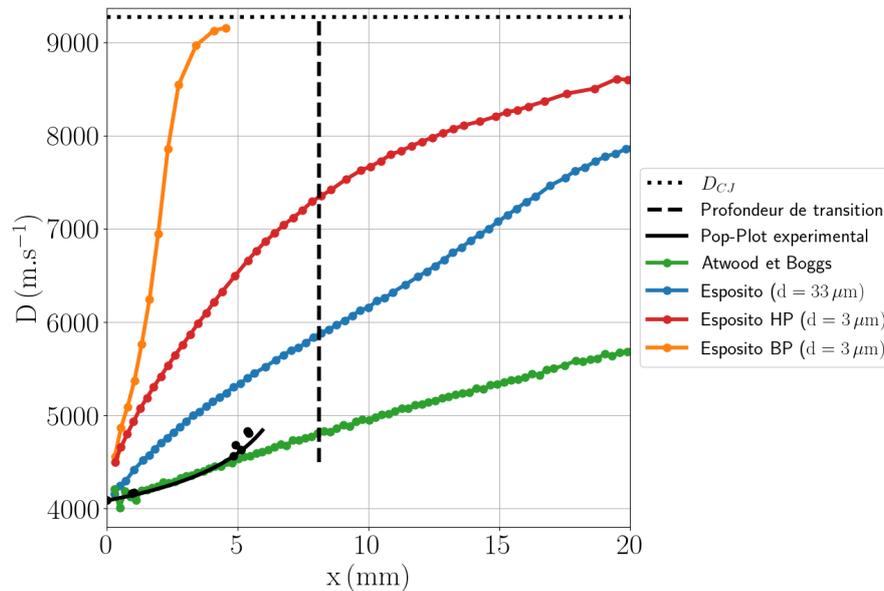


FIGURE 11.2 – Évolution spatiale de la vitesse du choc obtenue pour des simulations réalisées avec des jeux de paramètres issus de la littérature pour la loi de vitesse de déflagration.

Ces premiers résultats, obtenus pour une microstructure grossière, indiquent que les vitesses de déflagration issues de la littérature employées avec un modèle réactif de régression de surface ne permettent pas de restituer le Pop-Plot du HMX comprimés. Comme nous avons pu le voir en section 10.2, pour des microstructures plus fines, la vitesse du choc augmente. Par conséquent, pour des microstructures représentatives du HMX comprimé, les différences avec le Pop-Plot expérimental seraient encore plus marquées que celles observées en figure 11.2.

Le modèle réactif de régression de surface ne permet donc pas de reproduire la sensibilité au choc du HMX comprimé avec les données issues de la littérature. Dans la suite de ce chapitre, l'objectif sera donc de déterminer la capacité du modèle à restituer le Pop-Plot expérimental du HMX comprimé avec une vitesse de déflagration adaptée.

11.2 Phénoménologie observée dans les simulations

Tout d'abord, étudions la phénoménologie observée dans les simulations réalisées avec une vitesse de déflagration dépendante de la pression pour deux jeux de paramètres de la loi de vitesse de déflagration. Dans un premier temps, nous utiliserons un jeu de paramètres avec un coefficient n faible, d'une valeur de 1.2, et un paramètre $b = 200 \text{ m s}^{-1}$. Ensuite, nous emploierons un second jeu de paramètres avec un coefficient n élevé, d'une valeur de 3.5 et un paramètre $b = 2300 \text{ m s}^{-1}$. L'évolution de la vitesse de déflagration en fonction de la pression pour ces deux jeux de paramètres est illustrée en figure 11.3 et 11.4. Les données expérimentales étant tridimensionnelles, celles-ci ont été adaptées à une configuration 2D avec la relation 11.5 sur la figure 11.3. Inversement, sur la figure 11.4, les paramètres de la simulations ont été adaptés à une configuration 3D et les données expérimentales sont inchangées. Les simulations sont réalisées avec une vitesse d'impact de 800 m s^{-1} et la microstructure employée possède un diamètre équivalent moyen de $\overline{d_{eq}} = 162 \mu\text{m}$.

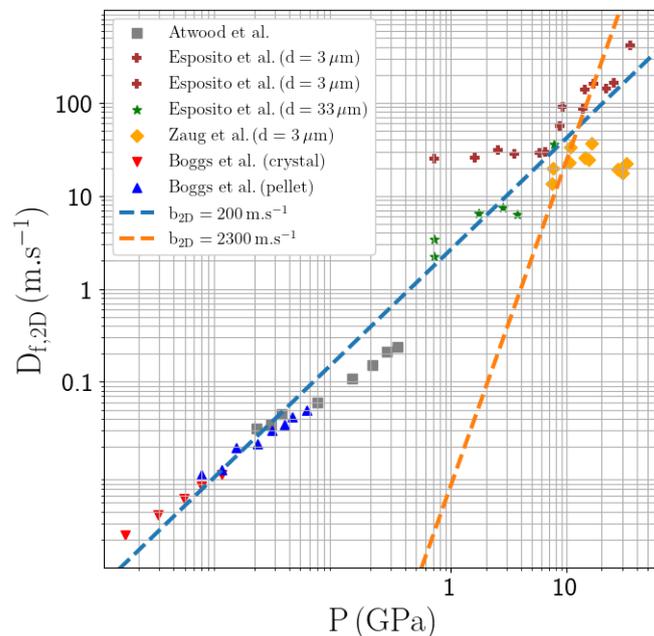


FIGURE 11.3 – Évolution de la vitesse de déflagration en fonction de la pression pour les jeux de paramètres $b = 200 \text{ m s}^{-1}$, $n = 1.2$ et $b = 2300 \text{ m s}^{-1}$, $n = 3.5$. Les données expérimentales étant tridimensionnelles, celles-ci ont été adaptées à une configuration 2D avec la relation 11.5.

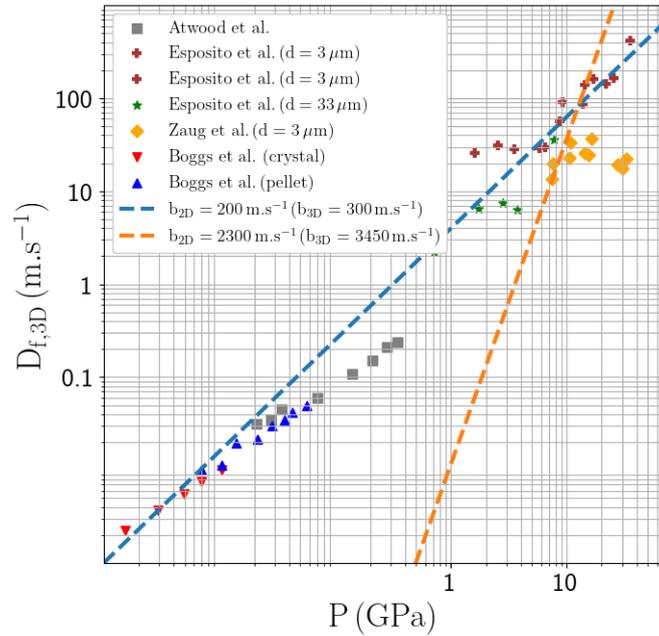


FIGURE 11.4 – Évolution de la vitesse de déflagration en fonction de la pression pour les jeux de paramètres $b = 200 \text{ m s}^{-1}$, $n = 1.2$ et $b = 2300 \text{ m s}^{-1}$, $n = 3.5$ après adaptation à une configuration 3D avec la relation 11.5.

Dans un premier temps, focalisons-nous sur la simulation avec le jeu de paramètres $n = 1.2$ et $b = 200 \text{ m s}^{-1}$. Au cours de cette simulation, les champs de fraction brûlée ont été extraits et tracés à six instants (voir figure 11.5). Seule une zone de $3 \text{ mm} \times 3 \text{ mm}$ après le front de choc est illustrée afin de bien distinguer les grains durant leur combustion. L'évolution spatiale de la fraction brûlée moyenne à ces instants est également représentée.

On peut ainsi voir qu'au début de la propagation de l'onde de choc ($t < 1.75 \mu\text{s}$), la combustion des grains de HMX est lente car la pression du choc est encore relativement faible (figure 11.6). La fraction brûlée moyenne n'atteint pas la valeur de 1 dans la zone de $3 \text{ mm} \times 3 \text{ mm}$ derrière le front de choc. À mesure que l'onde de choc se propage et que sa pression augmente, la combustion des grains s'accélère et l'épaisseur de la zone de réaction diminue. Ainsi, à $t = t_6$, la fraction brûlée atteint une valeur de 1 dans la zone $3 \text{ mm} \times 3 \text{ mm}$ derrière le front de choc. Les champs de fraction brûlée sont qualitativement semblables à ceux observés dans le chapitre 10 : les réactions chimiques sont amorcées à la surface des grains qui brûlent progressivement jusqu'à être entièrement consommés.

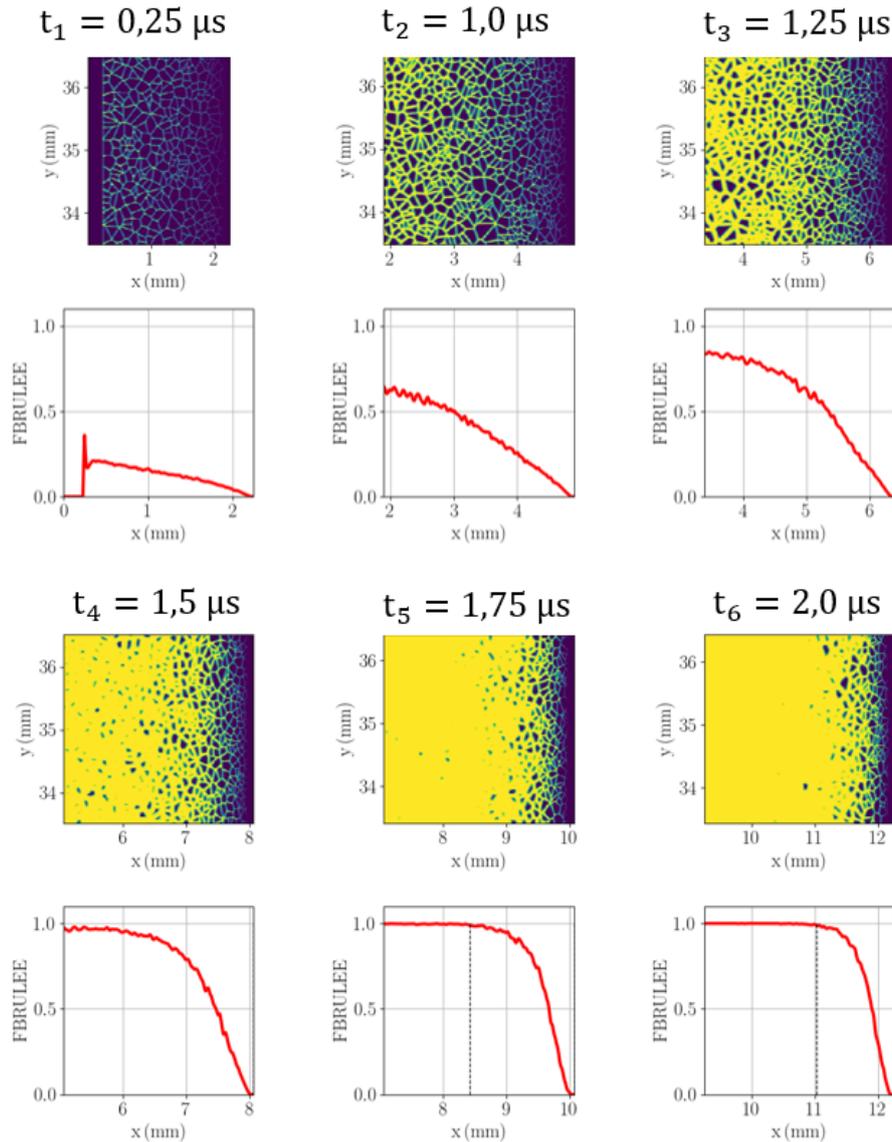


FIGURE 11.5 – Illustration du champ de fraction brûlée et de l'évolution spatiale de la fraction brûlée moyenne dans une zone de $3\text{ mm} \times 3\text{ mm}$ derrière le front de choc à différents instants. La simulation est réalisée avec une vitesse d'impact $v_i = 800\text{ m s}^{-1}$ et une microstructure ayant un diamètre équivalent moyen $\overline{d_{eq}} = 162\text{ }\mu\text{m}$. Une vitesse de déflagration dépendante de la pression est employée avec un paramètre $b = 200\text{ m s}^{-1}$ et un coefficient $n = 1.2$.

L'évolution de la pression moyenne et de son intervalle de confiance est présentée sur la figure 11.6. Les profils sont tracés aux mêmes temps que ceux de la figure 11.5. À $t_1 = 0.25\text{ }\mu\text{s}$, les réactions chimiques sont encore minoritaires et la pression dans l'explosif est similaire au palier de pression induit par l'impact. À $t_2 = 1.0\text{ }\mu\text{s}$, les réactions chimiques se sont développées et contribuent à une augmentation de la pression en aval du choc. Un léger pic de pression apparaît au front de choc. À mesure que les réactions se développent, les ondes de compression s'accumulent à proximité de l'onde de choc. Cette accumulation se traduit par la formation d'une légère bosse sur le signal de pression (t_3 et t_4). Comme le choc est subsonique par rapport au milieu aval, cette accumulation d'ondes de compression finit par rattraper le front de choc à

$t_5 = 1.75 \mu\text{s}$. La pression au front de choc est alors proche de la pression de von-Neuman. De t_5 à t_6 , l'augmentation de la pression devient plus douce et est principalement localisée au choc.

Au cours de la simulation, l'intervalle de confiance $\bar{P} \pm 2\sigma$ associé à la pression est très peu étendu. Le champ de pression est donc *quasi* uniforme.

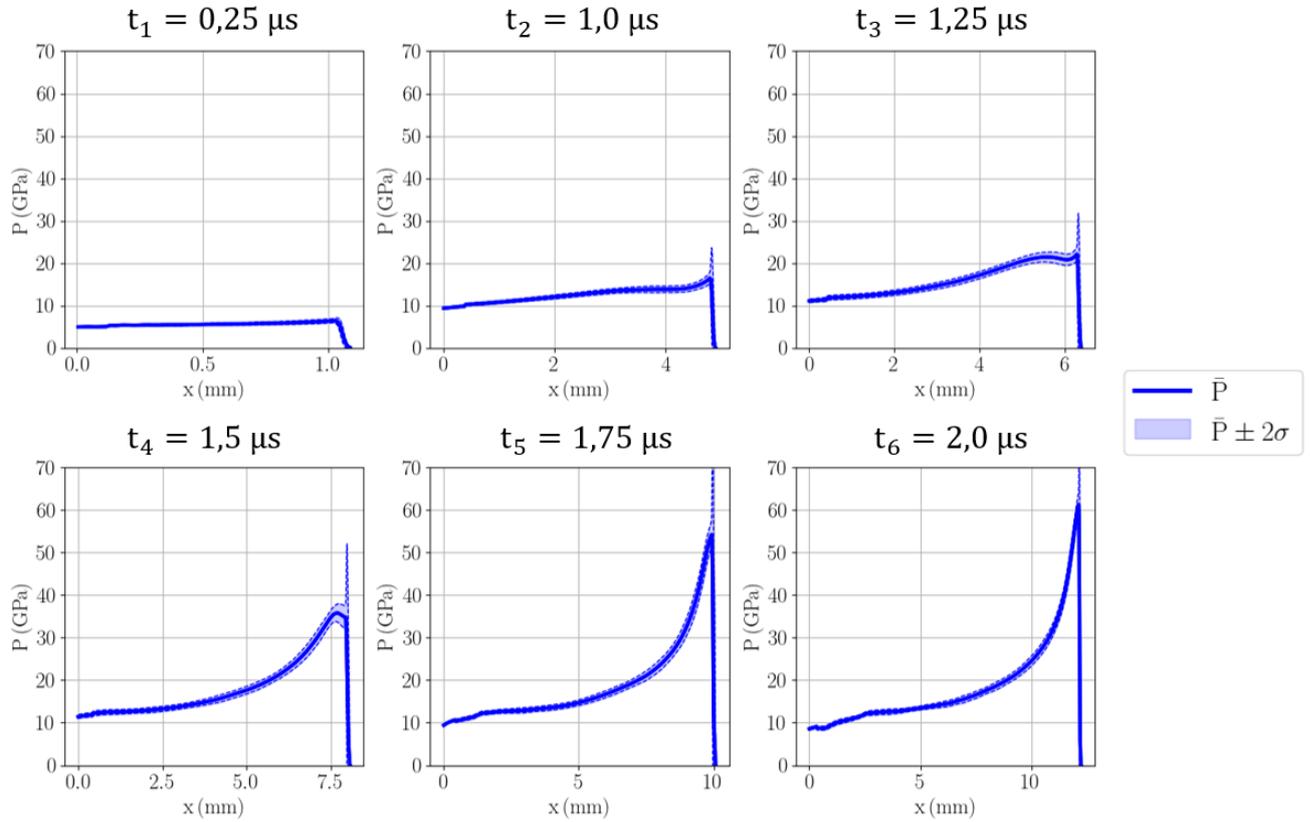


FIGURE 11.6 – Évolution spatiale de la pression moyenne et de son intervalle de confiance à différents instants. Une microstructure avec un diamètre équivalent moyen de $\bar{d}_{eq} = 162 \mu\text{m}$ est employée ainsi qu'une vitesse d'impact de $v_i = 800 \text{ m s}^{-1}$. Une vitesse de déflagration dépendante de la pression est utilisée avec un paramètre $b = 200 \text{ m s}^{-1}$ et un coefficient $n = 1.2$.

Sur la figure 11.7, l'évolution temporelle de la vitesse du choc est tracée avec les temps associés aux figures 11.5 et 11.6. De t_1 à t_3 , la vitesse du choc évolue *quasi* linéairement. À partir de t_3 , lorsque les ondes de compression s'accumulent à proximité du front de choc, l'accélération du choc devient plus importante. Cette augmentation de l'accélération persiste jusqu'aux environs de t_5 , ce qui correspond au moment où les ondes de compression qui s'étaient accumulées rattrappent le front de choc. Au delà de t_5 , l'accélération de l'onde de choc diminue jusqu'à ce que la vitesse de choc converge vers D_{CJ} .

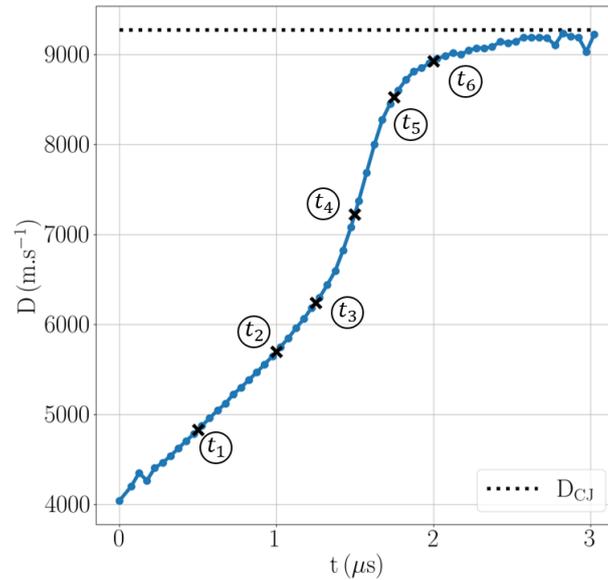


FIGURE 11.7 – Évolution spatiale de la vitesse du choc lors de la TCD, pour une vitesse d'impact de $v_i = 800 \text{ m s}^{-1}$ et une microstructure avec un diamètre équivalent moyen de $\overline{d_{eq}} = 162 \mu\text{m}$. Une vitesse de déflagration dépendante de la pression est employée, avec un paramètre $b = 200 \text{ m s}^{-1}$ et un coefficient $n = 1.2$. Les temps issus de la figure 11.6 sont notés.

La simulation réalisée avec le jeu de paramètres $n = 3.5$ et $b = 2300 \text{ m s}^{-1}$ présente une phénoménologie différente. La figure 11.8 illustre les champs de fraction brûlée dans une zone de $3 \text{ mm} \times 3 \text{ mm}$ après le front de choc à cinq instants de la simulation. L'évolution spatiale de la fraction brûlée moyenne à ces instants est également représentée.

On peut ainsi voir qu'au début de la propagation de l'onde de choc ($t < 1.65 \mu\text{s}$), la combustion des grains de HMX est très lente. En effet, la valeur de la vitesse de déflagration étant plus faible à la pression de sollicitation, la fraction brûlée moyenne ne dépasse pas 0.25 dans l'écoulement. À $t_2 = 1.8 \mu\text{s}$, la réactivité des grains s'intensifie et la fraction brûlée moyenne atteint une valeur proche 0.5 à proximité de l'onde de choc. Au temps suivant, à $t_3 = 1.85 \mu\text{s}$, des réactions chimiques violentes apparaissent à proximité du front de choc. Les zones où ont lieu ces réactions sont très localisées au départ mais conduisent rapidement à l'accélération des fronts de déflagration dans leur champ proche ($t = 1.9 \mu\text{s}$). Du fait des valeurs associées au coefficient n et au paramètre b , la vitesse de déflagration devient très importante pour des pressions élevées. À partir du temps t_4 , le front de déflagration et le front de choc sont donc confondus. On est donc passé d'une combustion de grains à un front de détonation similaire à une description macroscopique. Sur le profil moyen de fraction brûlée, le passage d'une valeur de 0 à 1 n'est pas instantané mais cela est principalement dû au fait que les réactions chimiques violentes induisent un plissement du choc.

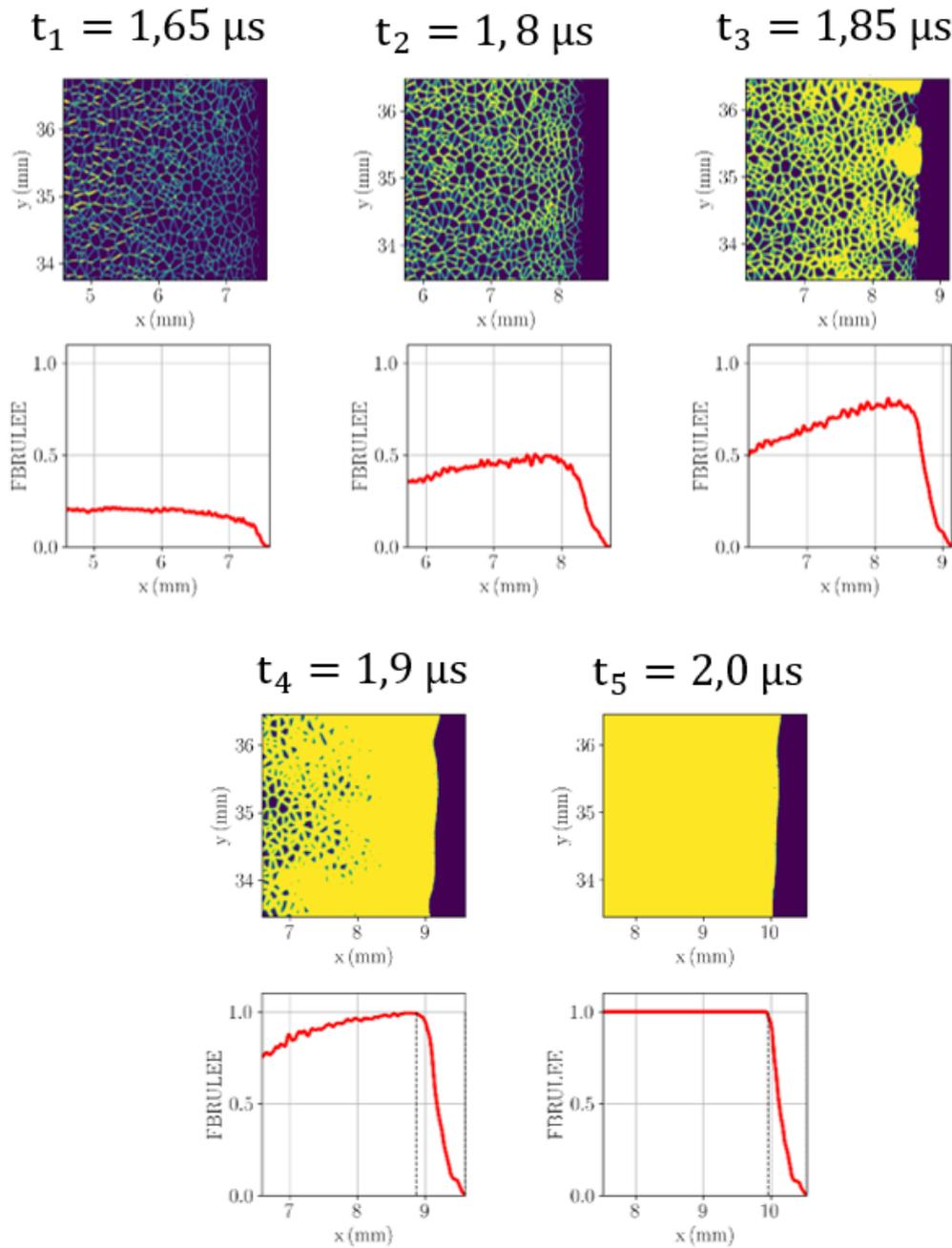


FIGURE 11.8 – Illustration du champ de fraction brûlée et de l'évolution spatiale de la fraction brûlée moyenne dans une zone de $3 \text{ mm} \times 3 \text{ mm}$ derrière le front de choc à différents instants. La simulation est réalisée avec une vitesse d'impact $v_i = 800 \text{ m s}^{-1}$ et une microstructure ayant un diamètre équivalent moyen $\overline{d_{eq}} = 162 \mu\text{m}$. Une vitesse de déflagration dépendante de la pression est employée avec un paramètre $b = 2300 \text{ m s}^{-1}$ et un coefficient $n = 3.5$.

Afin de mieux visualiser les réactions dans le coin, la figure 11.9 illustre les champs de fraction brûlée dans tout l'écoulement aux mêmes instants que ceux représentés sur la figure 11.8. Un instant ultérieur a été ajouté afin de mieux visualiser les réactions dans l'écoulement aval au choc. On peut ainsi voir qu'au temps $t_1 = 1.65 \mu\text{s}$, les réactions sont minoritaires dans tout le coin. Au temps $t_2 = 1.8 \mu\text{s}$, des réactions violentes sont apparues au front de choc. Cependant, celles-ci sont apparues en dehors de la zone illustrée en figure 11.8. Au temps t_3 , on observe

que ces réactions très localisées apparaissent sur toute la longueur du front de choc. À partir du temps t_4 , les réactions remontent l'écoulement aval.

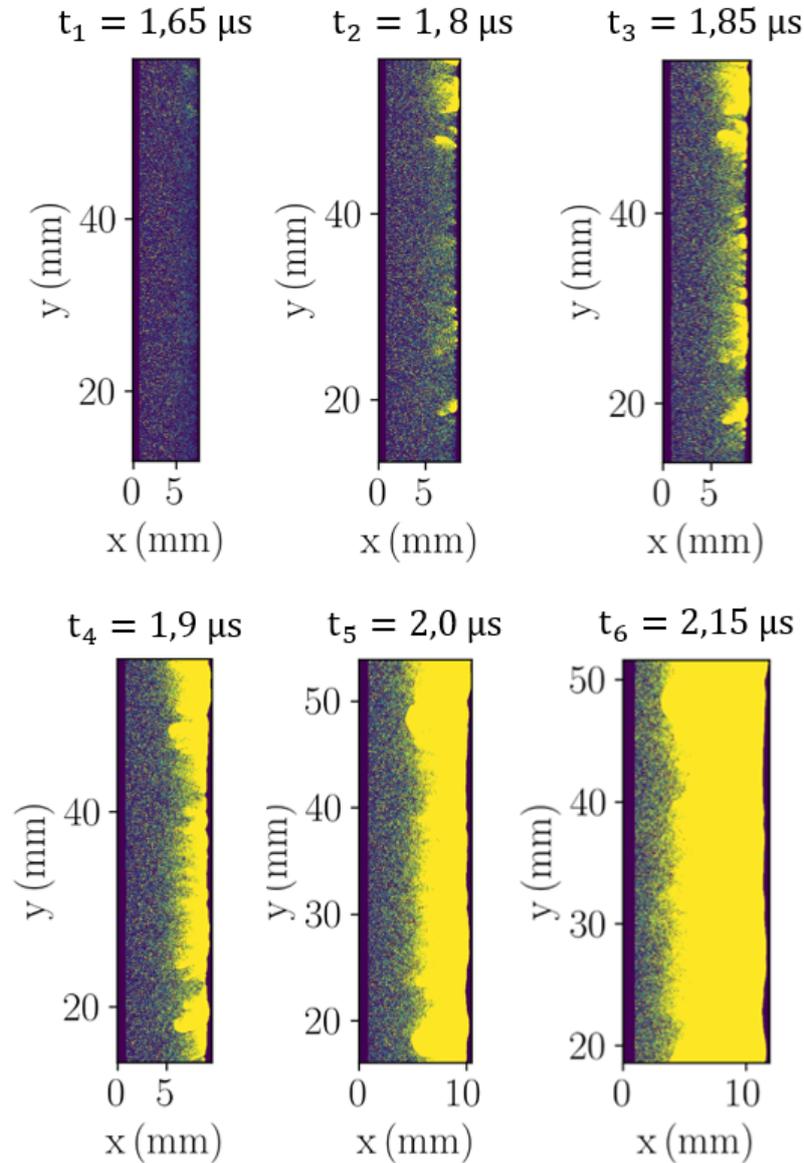


FIGURE 11.9 – Illustration du champ de fraction brûlée à différents instants dans la zone d'intérêt du coin. La simulation est réalisée avec une vitesse d'impact $v_i = 800 \text{ m s}^{-1}$ et une microstructure ayant un diamètre équivalent moyen $\overline{d_{eq}} = 162 \mu\text{m}$. Une vitesse de déflagration dépendante de la pression est employée avec un paramètre $b = 2300 \text{ m s}^{-1}$ et un coefficient $n = 3.5$.

L'apparition de ces réactions violentes résulte de l'interaction entre des ondes de compression qui induisent une élévation locale de la pression. Le coefficient n étant élevé, cela provoque une forte augmentation de la vitesse de déflagration. Ce phénomène s'accompagne d'une libération importante d'énergie sous la forme d'ondes de compression qui se propagent vers le projectile et qui accélèrent tous les fronts de déflagration de l'écoulement aval au choc.

L'évolution de la pression moyenne et de son intervalle de confiance est présentée sur la figure 11.10. Les profils sont tracés aux mêmes instants que ceux de la figure 11.9.

Comme mentionné précédemment, à $t_1 = 1.65 \mu\text{s}$, peu de réactions chimiques ont eu lieu dans l'explosif. Naturellement, la pression dans l'écoulement est encore relativement faible et proche du palier de pression induit par le choc au moment de l'impact. Aux temps t_2 et t_3 , l'emballement des réactions chimiques au front de choc débute. Comme celles-ci sont très localisées, il en résulte une forte hétérogénéité du champ de pression dans l'explosif. La pression moyenne au front de choc a alors considérablement augmenté. De t_4 à t_6 , on peut voir que les ondes de compression générées par les réactions violentes se propagent vers l'arrière. Elles accélèrent ainsi les fronts de déflagration ce qui achève la combustion des grains. Le champ de pression associé aux ondes de compression est alors fortement hétérogène. Enfin, les fronts de déflagration locaux sont très rapides de t_4 à t_6 , ce qui engendre des zones de réaction très fines (figure 11.8 et 11.9). Ainsi, la pression moyenne post-choc se rapproche de la pression de Chapman-Jouguet bien que l'on observe localement des pics de pression proches de l'état de von-Neumann.

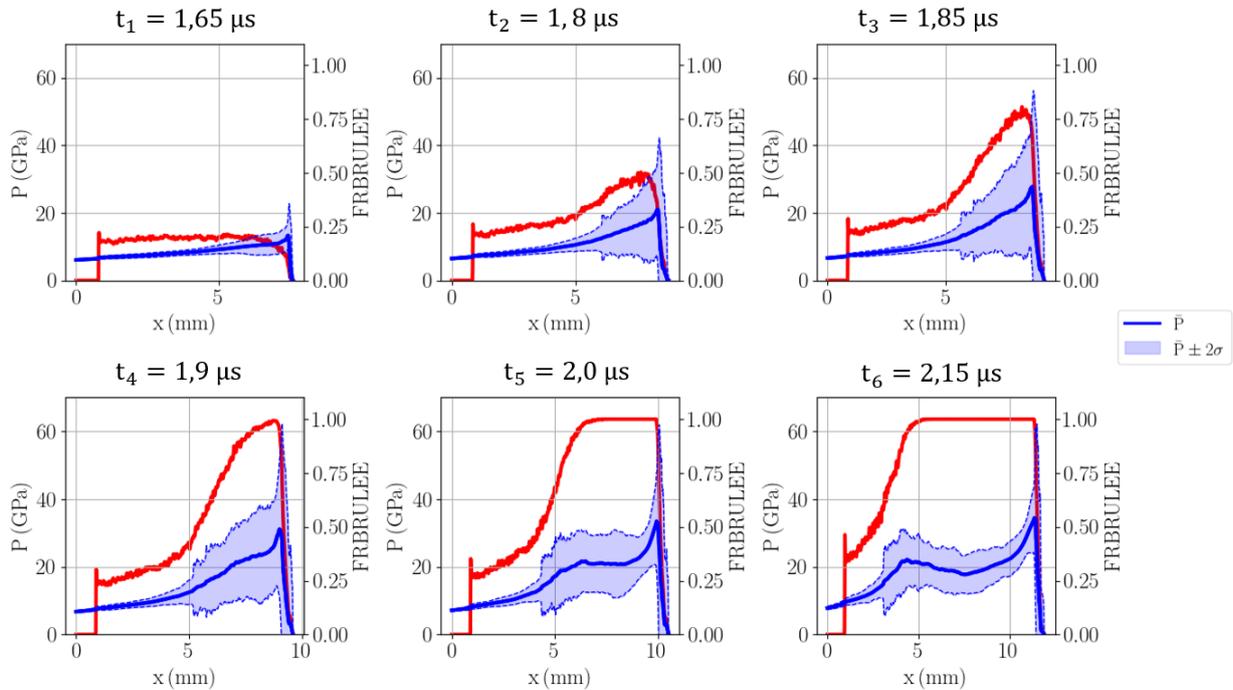


FIGURE 11.10 – Évolution spatiale de la pression moyenne et de son intervalle de confiance à différents instants. Les profils de fraction brûlée moyenne sont également tracés. Une microstructure avec un diamètre équivalent moyen de $\bar{d}_{eq} = 162 \mu\text{m}$ est employée ainsi qu'une vitesse d'impact de $v_i = 800 \text{m s}^{-1}$. Une vitesse de déflagration dépendante de la pression est utilisée avec un paramètre $b = 2300 \text{m s}^{-1}$ et un coefficient $n = 3.5$.

Sur la figure 11.11, l'évolution temporelle de la vitesse du choc est tracée et fait apparaître les temps associés aux figures 11.9 et 11.10. Jusqu'au temps $t_1 = 1.65 \mu\text{s}$, l'accélération du choc est faible et la vitesse du choc n'augmente que de 1500m s^{-1} . À partir de cet instant, la vitesse du choc augmente drastiquement. De t_2 à t_4 , *i.e.* au moment de l'emballement des réactions au front de choc, l'augmentation de la vitesse du choc s'intensifie. Au temps t_4 , elle atteint une valeur

proche de la vitesse de détonation stationnaire D_{CJ} . La vitesse du choc converge ensuite autour de D_{CJ} en oscillant légèrement.

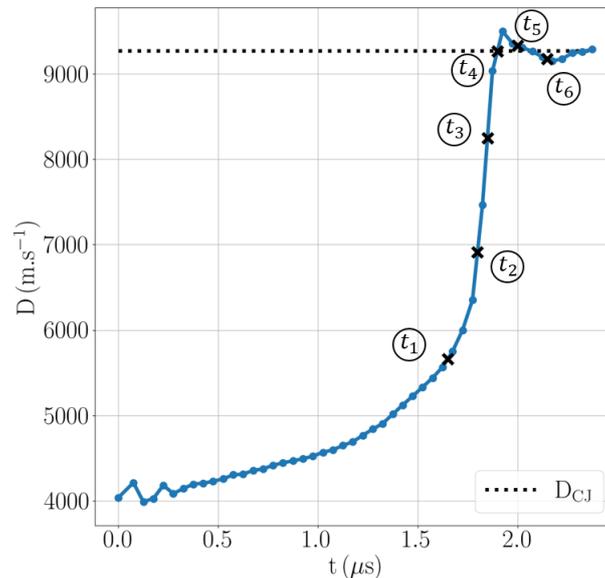


FIGURE 11.11 – Évolution spatiale de la vitesse du choc lors de la TCD pour une vitesse d'impact de $v_i = 800 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ et une microstructure avec un diamètre équivalent moyen de $\overline{d_{eq}} = 162 \mu\text{m}$. Une vitesse de déflagration dépendante de la pression est employée, avec un paramètre $b = 2300 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ et un coefficient $n = 3.5$. Les temps issus de la figure 11.10 sont notés.

Selon le jeu de paramètres employé pour la vitesse de déflagration, les simulations présentent une phénoménologie différente. Pour un coefficient n proche de l'unité, l'évolution du choc dans le coin est proche de celle observée pour des vitesses de déflagration constantes. Néanmoins, contrairement aux simulations avec une vitesse de déflagration constante, les ondes de compression à proximité du front de choc s'accumulent et rattrapent le choc, ce qui intensifie son accélération. Pour un coefficient n plus élevé, les phénomènes observés lors de la TCD diffèrent fortement. Initialement, l'accélération du choc est relativement faible. Au bout d'un certain temps, les réactions s'emballent de façon localisée au front de choc, ce qui s'accompagne d'une accélération brutale du choc.

Nous avons donc, d'un côté, une accélération du choc très progressive et induite par des ondes de compression issues en partie de l'écoulement aval et, de l'autre, une accélération du choc plus brutale avec une transition en détonation principalement pilotée par des réactions localisées apparaissant à proximité du front de choc.

11.3 Détermination d'un premier jeu de paramètres pour la vitesse de déflagration du HMX

L'objectif de cette section est de déterminer un jeu de paramètres adapté pour restituer le Pop-Plot expérimental du HMX comprimé. Afin d'orienter la recherche de ce jeu de paramètres,

il est possible d'établir les prévisions suivantes à partir de l'équation 11.2 :

1. l'augmentation du paramètre b permet d'augmenter la vitesse de déflagration du HMX et ce, pour toutes les valeurs de pression. Par conséquent, l'accélération de l'onde de choc sera plus marquée tout au long de la TCD, et la transition en détonation sera plus rapide ;
2. l'augmentation du coefficient n permet de réduire la vitesse de déflagration du HMX pour des pressions $P < P_{CJ}$ et de l'accélérer pour des pressions $P > P_{CJ}$. Ainsi, l'accélération du choc est réduite pour des pressions assez faibles. Cependant, une fois la pression de Chapman-Jouguet atteinte, son accélération est plus importante. On a donc une onde de choc qui transite plus tardivement, mais dont la transition est plus brutale.

Une illustration de l'influence des paramètres b et n sur la vitesse de déflagration et de l'effet d'une variation de ces paramètres sur la vitesse de choc est présentée en figure 11.12.

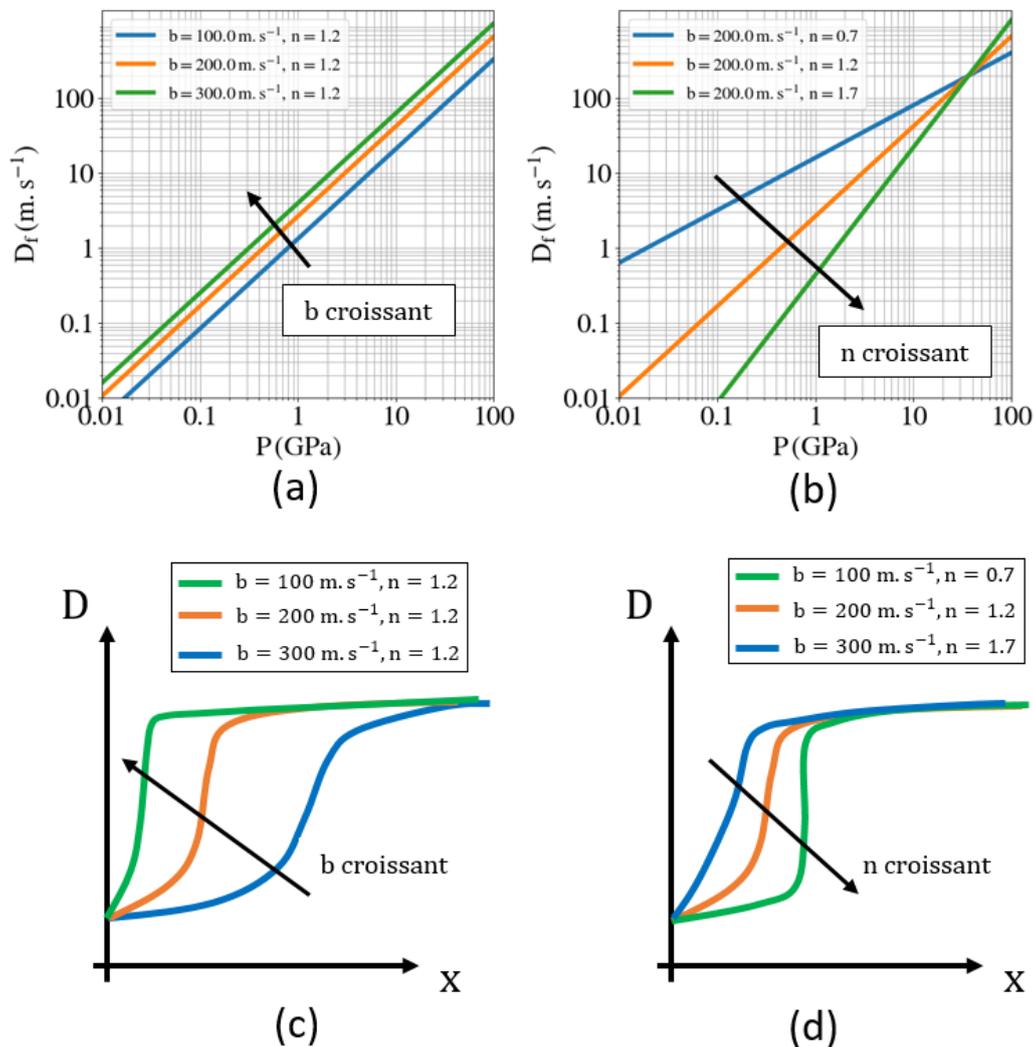


FIGURE 11.12 – (a) Influence du paramètre b sur la loi de vitesse de déflagration ; (b) Influence du coefficient n sur la loi de vitesse de déflagration ; (c) Prévision des évolutions spatiales de la vitesse du choc obtenue avec les jeux de paramètres issus de (a) ; (d) Prévision des évolutions spatiales de la vitesse du choc obtenue avec les jeux de paramètres issus de (b).

Des simulations ont ainsi été réalisées avec des vitesses de déflagration dont le paramètre b est compris entre 50 m s^{-1} et 3000 m s^{-1} et dont le coefficient n varie de 1.0 à 4.0. La vitesse d'impact employée est de 800 m s^{-1} et la microstructure utilisée possède un diamètre équivalent moyen $\overline{d_{eq}} = 162 \mu\text{m}$.

La figure 11.13 illustre l'influence du coefficient n sur l'évolution de la vitesse du choc, pour quatre valeurs du paramètre b comprises entre 400 m s^{-1} et 1400 m s^{-1} . À titre de référence, le Pop-Plot expérimental du HMX est également tracé sous l'hypothèse de courbe unique. Les profils de vitesse de choc issus des simulations sont recalés sur le premier point du Pop-Plot dans le plan (x, D) . Cela revient à se placer dans un référentiel de transition pour un critère de transition basé sur une vitesse de référence D_{ref} . La vitesse de référence choisie est alors $D_{ref} = D_{\min, \text{pop-plot}}$ où $D_{\min, \text{pop-plot}}$ est la vitesse associée au premier point du Pop-Plot.

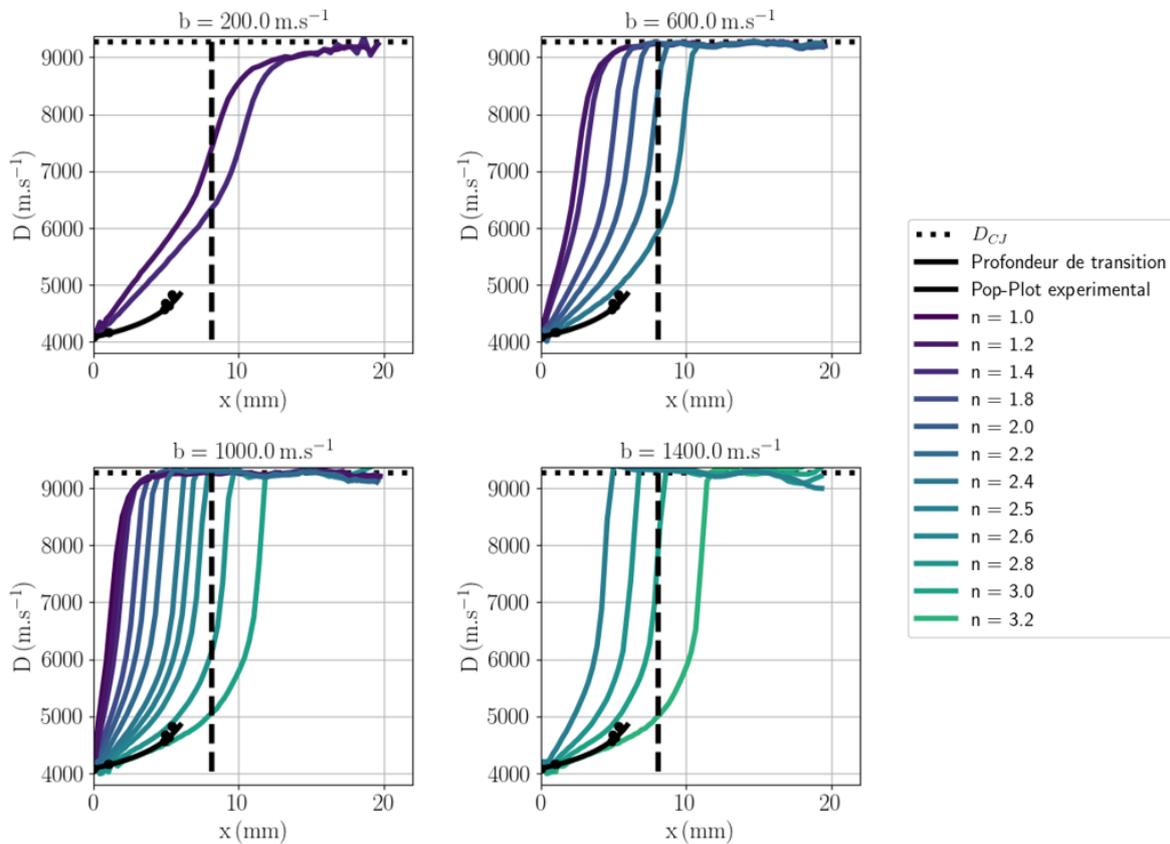


FIGURE 11.13 – Influence du coefficient n de la loi de vitesse de déflagration sur l'évolution spatiale de la vitesse du choc, pour quatre valeurs du paramètre b . Les profils sont tracés pour une microstructure à $\overline{d_{eq}} = 162 \mu\text{m}$ et une vitesse d'impact de 800 m s^{-1} .

Sur cette figure, comme attendu, nous pouvons observer que plus le coefficient n est élevé, plus l'évolution du choc tend vers un comportement similaire à celui illustré en figure 11.11 avec le jeu de paramètres $b = 2300 \text{ m s}^{-1}$ et $n = 3.5$. En revanche, pour des valeurs de n proches de l'unité, l'évolution de la vitesse de choc tend à se rapprocher d'un comportement tel que celui illustré en figure 11.7 avec le jeu de paramètres $b = 200 \text{ m s}^{-1}$ et $n = 1.2$. Pour des valeurs de

n inférieures à 1.8, la vitesse du choc est toujours plus élevée que celle prédite par le Pop-Plot expérimental. Cela signifie que la réactivité est trop importante et induit une accélération trop forte au choc. Dans les simulations réalisées avec $n < 1.8$, la vitesse de déflagration est donc trop élevée au début de la propagation du choc. Au vu de ces résultats, il semblerait qu'un coefficient n compris entre 2.5 et 3.5 soit plus adapté pour restituer le Pop-Plot expérimental.

La figure 11.14 illustre l'influence du paramètre b pour quatre valeurs du coefficient n comprises entre 2.5 et 4.0. On peut ainsi constater que l'augmentation du paramètre b s'accompagne systématiquement d'une accélération plus importante de l'onde de choc. Ces derniers résultats suggèrent qu'un coefficient n de l'ordre de 3.5 devrait permettre d'obtenir des résultats plus proches du Pop-Plot expérimental.

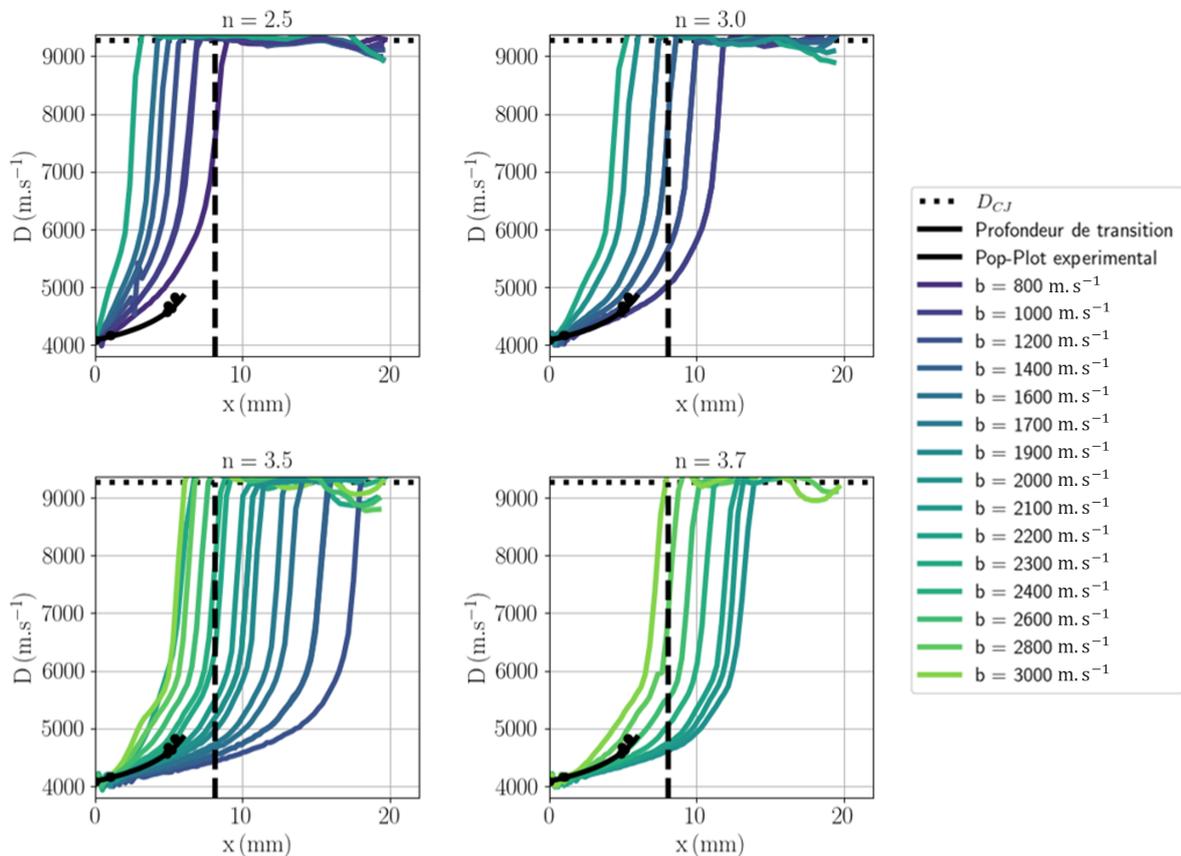


FIGURE 11.14 – Influence du paramètre b de la vitesse de déflagration sur l'évolution spatiale de la vitesse du choc, pour quatre valeurs du coefficient n . Les profils sont tracés pour une microstructure à $\overline{d_{eq}} = 162 \mu\text{m}$ et une vitesse d'impact de 800 m s^{-1} .

Si l'on suppose que l'hypothèse de courbe unique est vérifiée pour les simulations avec une vitesse de déflagration $D_f = D_f(P)$, alors on constate que des valeurs de n et de b respectivement proches de 3.5 et 2000 m s^{-1} devraient permettre d'approcher le Pop-Plot expérimental du HMX comprimé.

Suite à ces travaux, un jeu de paramètres permettant d'obtenir des résultats proches du Pop-Plot expérimental a été identifié :

$$\begin{cases} b = 2300 \text{ m s}^{-1} \\ n = 3.5 \end{cases} \quad (11.6)$$

Les résultats obtenus pour un test du coin avec ce jeu de paramètres pour la vitesse de déflagration du HMX, et pour une vitesse d'impact fixée à 800 m s^{-1} , sont présentés en figure 11.15. Ce jeu de paramètres permet de restituer correctement l'évolution spatiale de la vitesse du choc issue du Pop-Plot. La profondeur de transition, en revanche, est plus délicate à comparer. En effet, les travaux desquels sont issues les données du Pop-Plot du HMX ne précisent pas le critère de transition employé [128]. Par conséquent, la profondeur de transition issue de la simulation est tracée pour deux critères de transition : le critère d'accélération maximale et le critère d'intersection des pentes. Selon le critère considéré, la transition du choc en détonation est estimée soit trop tôt, soit trop tard par rapport aux données expérimentales. L'écart entre les profondeurs de transition issues de la simulation et la profondeur de transition expérimentale est d'environ 1.1 mm pour les deux critères employés.

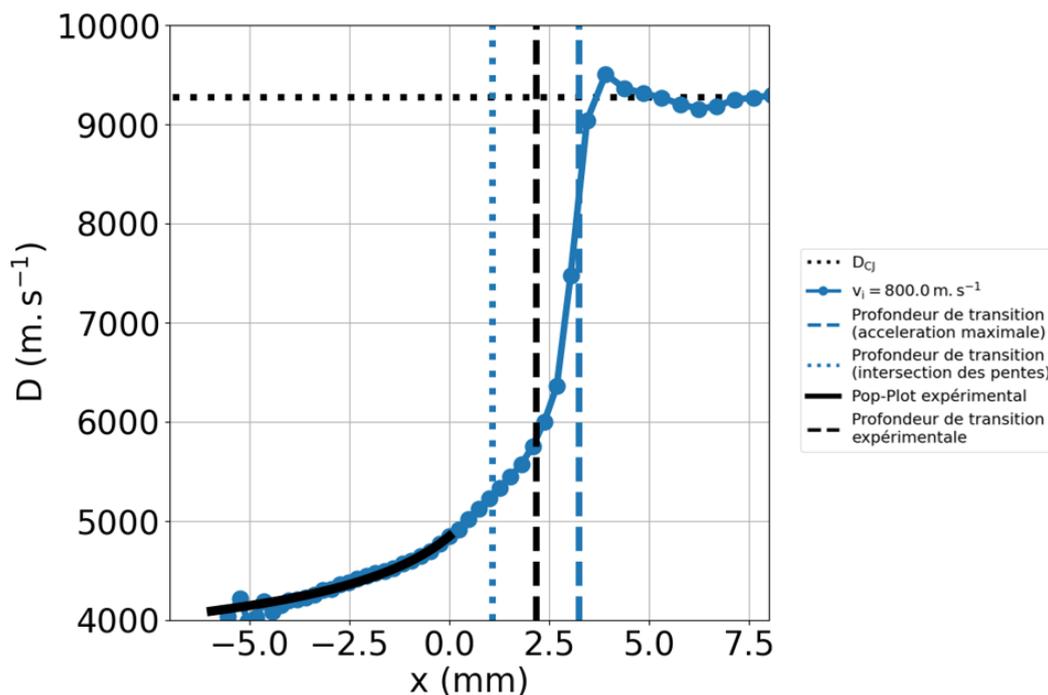


FIGURE 11.15 – Comparaison de l'évolution spatiale de la vitesse du choc, obtenue pour un coefficient $n = 3.5$ et un paramètre $b = 2300 \text{ m s}^{-1}$, au Pop-Plot expérimental du HMX comprimé tracé dans le plan (x, D) sous l'hypothèse de la courbe unique de transition.

Cette étude, réalisée pour des vitesses de déflagration dépendantes de la pression, a donc permis de montrer la capacité du modèle réactif à restituer le Pop-Plot expérimental du HMX comprimé. Un jeu de paramètres b et n pour lesquels l'évolution de la vitesse de choc semble compatible avec le Pop-Plot expérimental du HMX comprimé a également été identifié. Cependant,

du fait du manque d'information sur le critère de transition employé pour le Pop-Plot expérimental, une incertitude persiste quant à la validité de ces paramètres.

11.4 Passage à une microstructure représentative

Dans la section 10.4, nous avons défini des relations d'équivalence permettant d'obtenir des évolutions de choc similaires pour des microstructures avec des granulométries différentes. L'objectif de cette section est donc de déterminer si ces relations sont généralisables à des vitesses de déflagration dépendantes de la pression. Le jeu de paramètres identifié dans la section précédente pourra ainsi être adapté *via* ces relations d'équivalence pour une microstructure représentative.

Pour cela, considérons deux microstructures notées 1 et 2, dont les facteurs de forme associés sont respectivement $(S_0/V_0)_1$ et $(S_0/V_0)_2$. La microstructure 1 est associée à une vitesse de déflagration $D_{f,1} = b_1(P/P_{ref})^{n_1}$. Pour compenser la différence en termes de surface réactive, la loi de vitesse de déflagration $D_{f,2} = b_2(P/P_{ref})^{n_2}$ de la microstructure 2 devra être ajustée grâce aux relations suivantes :

$$b_2 = \frac{(S_0/V_0)_1}{(S_0/V_0)_2} b_1 \quad (11.7)$$

$$n_2 = n_1 \quad (11.8)$$

Afin de vérifier la validité de cette démarche, une microstructure avec un facteur de forme $(S_0/V_0)_1 = 30.6 \text{ mm}^{-1}$ et une vitesse de déflagration $D_{f,1} = b_1(P/P_{CJ})^{n_1}$ est prise comme référence. Deux jeux de paramètres ont été employées pour la microstructure de référence : $(b_1 = 200 \text{ m s}^{-1}, n_1 = 0.9)$ et $(b_1 = 300 \text{ m s}^{-1}, n_1 = 3.5)$. Deux microstructures ont ensuite été générées avec un facteur de forme $(S_0/V_0)_2 = 14.4 \text{ mm}^{-1}$ et $(S_0/V_0)_3 = 10.22 \text{ mm}^{-1}$, et leurs vitesses de déflagration ont été calculées avec les relations d'équivalence à partir des paramètres de la vitesse de déflagration $D_{f,1}$. Le tableau 11.2 répertorie les propriétés microstructurales des microstructures générées et les jeux de paramètres obtenus pour la vitesse de déflagration.

Les résultats de ces simulations numériques, obtenues avec une vitesse d'impact de 800 m s^{-1} , sont présentés sur la figure 11.16. Pour $n = 0,9$, l'évolution de la vitesse du choc semble être reproduite correctement par l'utilisation des relations d'équivalence 11.7 et 11.8. Cependant, pour un coefficient n de 3.5, l'évolution de l'onde de choc est sujette à des variations plus marquées. Les profils obtenus présentent tout de même des évolutions relativement similaires.

Ces résultats montrent que l'utilisation des relations d'équivalence peuvent être généralisées, dans une certaine mesure, pour des vitesses de déflagration dépendantes de la pression. Le passage d'une microstructure grossière à une microstructure plus fine fournit une bonne approximation des résultats, malgré quelques différences observées. Le jeu de paramètres, déterminé avec une

TABLE 11.2 – Jeux de paramètres pour la loi de vitesse de déflagration obtenus *via* les relations d'équivalence. La microstructure numérotée 1 est prise comme microstructure de référence.

Microstructure	Jeux de paramètres	
$(S_0/V_0)_1 = 30.6 \text{ mm}^{-1}$	$\begin{cases} n=0.9 \\ b=200 \text{ m s}^{-1} \end{cases}$	$\begin{cases} n=3.5 \\ b=300 \text{ m s}^{-1} \end{cases}$
$(S_0/V_0)_2 = 14.4 \text{ mm}^{-1}$	$\begin{cases} n=0.9 \\ b=424 \text{ m s}^{-1} \end{cases}$	$\begin{cases} n=3.5 \\ b=637 \text{ m s}^{-1} \end{cases}$
$(S_0/V_0)_3 = 10.22 \text{ mm}^{-1}$	$\begin{cases} n=0.9 \\ b=590 \text{ m s}^{-1} \end{cases}$	$\begin{cases} n=3.5 \\ b=884 \text{ m s}^{-1} \end{cases}$

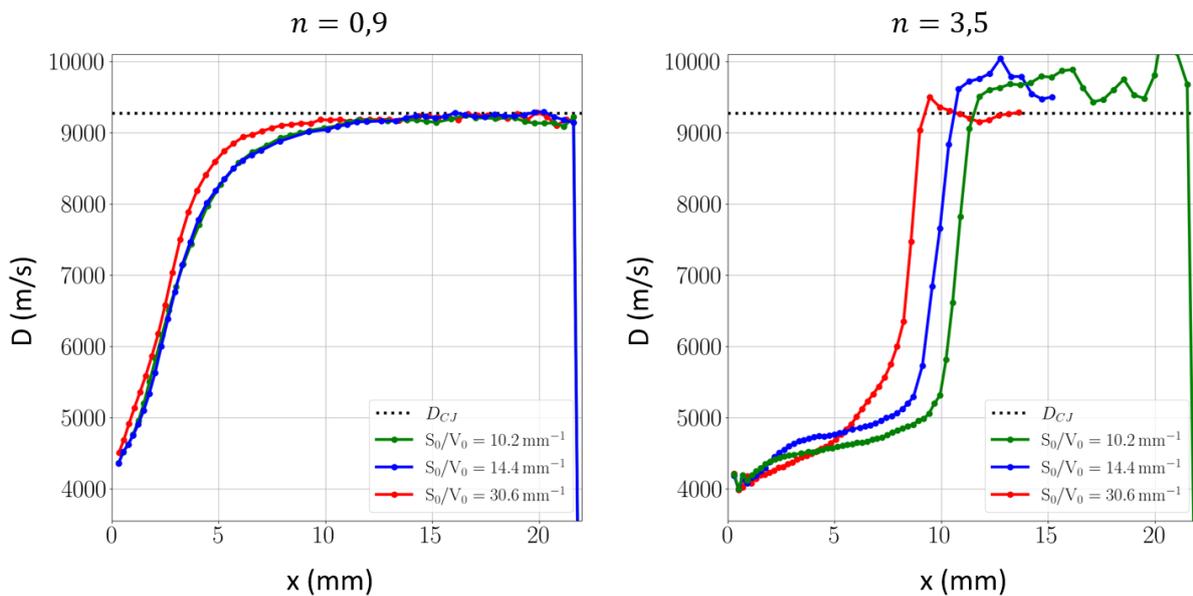


FIGURE 11.16 – Évolution spatiale de la vitesse du choc pour trois microstructures pour des vitesses de déflagration dépendantes de la pression. La microstructure à $\bar{d}_{eq} = 162 \mu\text{m}$ a été prise comme référence pour déterminer les paramètres de la loi de la vitesse de déflagration des deux autres microstructures.

microstructure grossière en section 11.3, peut ainsi être adaptée à une microstructure représentative du HMX comprimé *via* les relations 11.7 et 11.8. Si besoin, les paramètres obtenus peuvent ensuite être affinés afin de mieux restituer les données expérimentales.

Dans cette optique, une microstructure fine d'un diamètre équivalent moyen de $\bar{d}_{eq} = 48.8 \mu\text{m}$, davantage représentative du HMX comprimé, a été générée. Le facteur de forme associé à cette microstructure est $(S_0/V_0) = 102 \text{ mm}^{-1}$. En adaptant les paramètres de la vitesse de déflagration déterminés en section 11.3 sur une microstructure grossière à cette microstructure avec les relations d'équivalence 11.7 et 11.8, on obtient :

$$\begin{cases} b = 690 \text{ m s}^{-1} \\ n = 3.5 \end{cases}$$

Une simulation de test du coin a ensuite été réalisée avec une vitesse d'impact $v_i = 1400 \text{ m s}^{-1}$ sur cette microstructure. Les résultats obtenus sont comparés à ceux d'une simulation avec la même vitesse d'impact, pour le couple (microstructure, vitesse de déflagration) employé en section 11.3. Afin de garantir une dizaine de mailles dans les cristaux énergétiques, un maillage de $3 \mu\text{m}$ est employé avec la microstructure représentative. Les profils de vitesse de choc obtenus, présentés en figure 11.17 sont quasiment identiques. Le jeu de paramètres déterminé avec les relations 11.7 et 11.8 peut ainsi être utilisé comme tel et ne nécessite pas de correction supplémentaire.

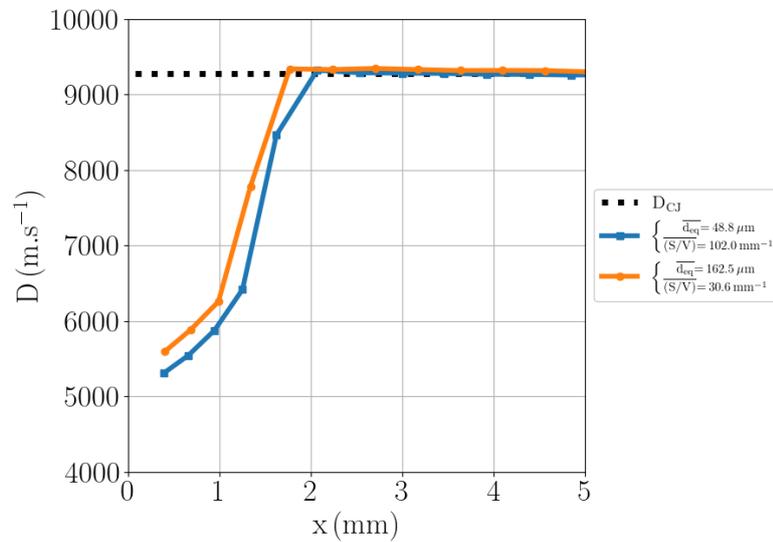


FIGURE 11.17 – Comparaison de l'évolution spatiale de la vitesse du choc obtenue pour des microstructures de diamètre moyen $\overline{d_{eq}} = 162 \mu\text{m}$ et $\overline{d_{eq}} = 49 \mu\text{m}$. La microstructure $\overline{d_{eq}} = 162 \mu\text{m}$ a été utilisée comme référence, et les paramètres de la vitesse de déflagration de la microstructure $\overline{d_{eq}} = 49 \mu\text{m}$ ont ensuite été déterminés avec les relations d'équivalence 11.7 et 11.8.

11.5 Comparaison aux données expérimentales

Dans les sections précédentes, nous avons déterminé un jeu de paramètres pour la vitesse de déflagration du HMX permettant de modéliser la TCD du HMX comprimé. Nous avons également vu dans la littérature que des données de vitesse de déflagration sont disponibles. Cependant, les paramètres déterminés à partir de ces données ne permettent pas de restituer le Pop-Plot du HMX comprimé. Cela peut s'expliquer, en partie, par le fait que celles-ci ont été réalisées soit à pression faible sur des cristaux, soit à des pressions représentatives de la TCD, mais sur de la

poudre de HMX.

Il est tout de même intéressant de confronter le jeu de paramètres que nous avons déterminé à partir du Pop-Plot à ces données expérimentales. Les cristaux de HMX ayant une géométrie tridimensionnelle, le jeu de paramètres a été adapté avec la relation 11.5. Ainsi, la figure 11.18 représente une mise à jour de la figure 7.3, à laquelle la vitesse de déflagration du HMX identifiée à partir des simulations mésoscopiques a été ajoutée. Dans la figure 11.18, les données issues de Boggs *et al.* [16] et Atwood *et al.* [140] sur des cristaux de HMX, ont été extrapolées aux pressions caractéristiques de la TCD. On peut ainsi voir que, pour des pressions $P < 12$ GPa, la vitesse de déflagration obtenue avec le jeu de paramètre $b = 690 \text{ m s}^{-1}$ et $n = 3.5$ est nettement inférieure à l'extrapolation des données issues de [16] et [140]. Au contraire, pour des pressions élevées ($P > 12$ GPa), la vitesse de déflagration obtenue par calibration est bien plus élevée que celle de l'extrapolation des données issues de [16] et [140]. Pour des pressions supérieures à 15 GPa, les mesures d'Esposito *et al.* [17] et de Zaug *et al.* [139] réalisées sur de la poudre de HMX sont du même ordre de grandeur que la vitesse de déflagration obtenue. Une bonne concordance est également obtenues avec la mesure de Johnson *et al.* [10] sur un cristal de HMX sous choc ^a.

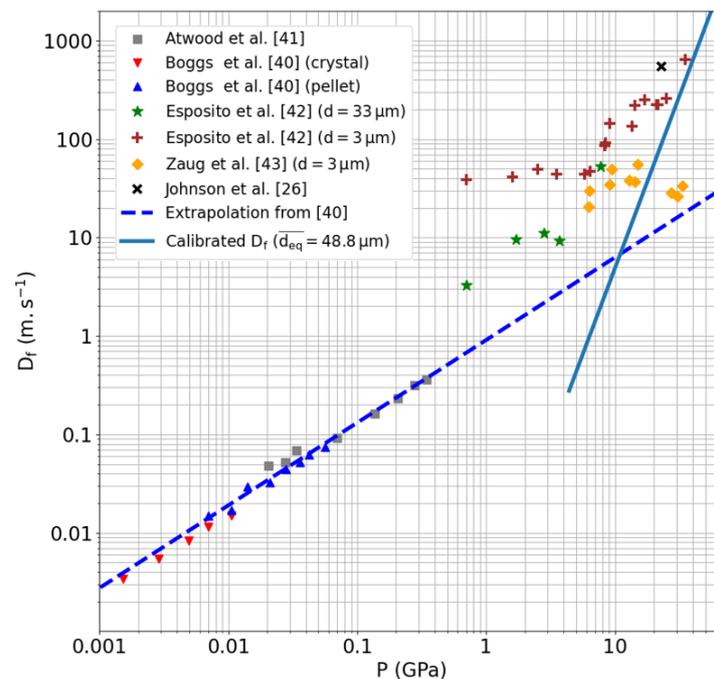


FIGURE 11.18 – Comparaison de la vitesse de déflagration obtenue *via* la calibration aux mesures disponibles dans la littérature.

a. Pour rappel, il est probable que le cristal de HMX ait été broyé par le choc et que cette mesure soit également représentative d'un comportement macroscopique (voir section 7.3).

La vitesse de déflagration obtenue par modélisation mésoscopique présente donc davantage de cohérence avec les vitesses de déflagration macroscopiques mesurées en enclume diamant qu'avec l'extrapolation des mesures sur cristaux énergétiques.

Dans les simulations, le modèle réactif suppose que toute la surface des cristaux est amorcée au passage de l'onde de choc. Or, dans les travaux de Johnson *et al.* [10], pour des vitesses d'impact faibles, seule une portion de la surface des cristaux était amorcée. Lors de la TCD, il est donc probable que, pour des pressions de choc assez faibles, amorcer la surface entière des cristaux engendre un excès de surface réactive. Dans les simulations, cet excès de surface réactive est compensé par une vitesse de déflagration plus faible à basse pression afin de restituer le Pop-Plot expérimental. De même, les simulations numériques réalisées ne tiennent pas compte de l'endommagement des cristaux de HMX, ou d'autres mécanismes d'apparition de points chauds tels que l'effondrement de pores. L'absence de ces mécanismes induit donc un déficit de surface réactive dans les simulations numériques, qui est compensé par une vitesse de déflagration plus élevée à haute pression.

En prenant les données de Boggs *et al.* [16] et Atwood *et al.*[140] comme données de référence, la calibration réalisée en terme de vitesse de déflagration peut également être vue comme une détermination de la surface réactive nécessaire pour restituer le Pop-Plot du HMX comprimé :

$$\dot{\lambda} = (S/V_0)D_{f,\text{calibration}} \iff \dot{\lambda} = (S/V_0)\left(1 + f(P)\right)D_{f,\text{expe}} \quad (11.9)$$

avec $f(P) = \left(D_{f,\text{calibration}}/D_{f,\text{expe}}\right) - 1$ correspondant à la fraction de surface réactive qu'il faudrait activer, en plus de la surface des cristaux de la microstructure, pour restituer le Pop-Plot du HMX comprimé. Si $f(P) < 0$, cela signifie que les surfaces réactives sont en excès, et $f(P)$ correspond à la proportion de surface réactive à inhiber afin de permettre la restitution du Pop-Plot.

La figure 11.19 représente l'évolution de $1 + f(P)$ en fonction de la pression. On peut ainsi voir que, pour $P < 12$ GPa, la fonction $f(P)$ est négative. Amorcer la surface entière des cristaux engendre donc trop de surface réactive dans les simulations. Pour une pression de 4.4 GPa, correspondant à la pression du premier point du Pop-Plot du HMX comprimé, il ne faudrait activer que 9% de la surface des cristaux. Au contraire, pour $P > 12$ GPa, la fonction $f(P)$ est positive, et l'amorçage de la surface des cristaux ne permet pas d'avoir suffisamment de surface réactive lors de la TCD. Pour une pression de l'ordre de P_{VN} , il faudrait environ 100 fois plus de surface réactive que celle fournie par la surface des cristaux de HMX. Ces surfaces manquantes correspondraient en fait à des mécanismes d'apparition des points chauds supplémentaires qui ne sont pas modélisés dans nos simulations numériques, comme la fracturation, ou l'effondrement de pores.

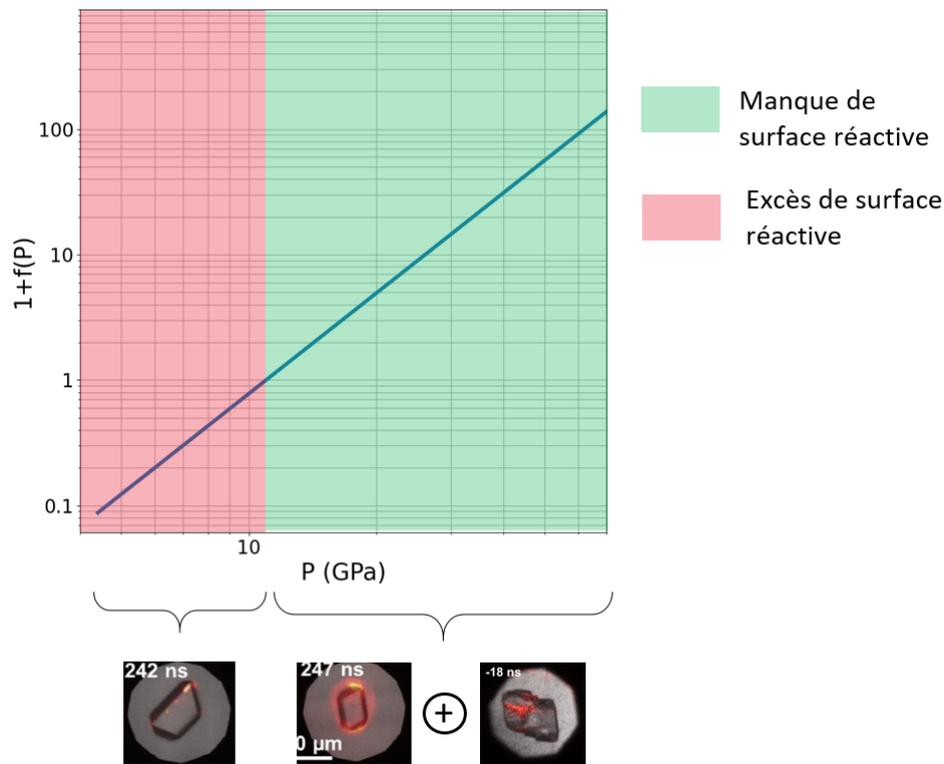


FIGURE 11.19 – Évolution de la proportion de surface réactive qui serait nécessaire à la restitution du Pop-Plot du HMX comprimé, sous l’hypothèse que les données issues de Boggs *et al.* [16] et Atwood *et al.* [140] sont généralisables aux pressions caractéristiques de la TCD. Cette proportion est exprimée par rapport à une microstructure de diamètre équivalent moyen $\overline{d_{eq}} = 48.8 \mu\text{m}$.

11.6 Influence de la microstructure sur la TCD de l'explosif

Dans la section précédente, les simulations réalisées ne mettaient en jeu qu’une seule microstructure. Or, par nature, la microstructure des explosifs est stochastique. Le jeu de paramètres identifié pour la vitesse de déflagration obtenu en section 11.4 requiert donc de considérer un ensemble de microstructures pour garantir sa validité. Cela est d’autant plus important que la section 11.2 a montré que, lors des simulations, la TCD était principalement pilotée par des réactions chimiques très localisées.

Dans cette optique, la microstructure employée en section 11.3 a été prise comme référence afin de générer cent microstructures équivalentes, *i.e* ayant des propriétés morphologiques similaires (voir tableau 11.3). Pour chacune de ces microstructures, une simulation a ensuite été réalisée avec une vitesse d’impact $v_i = 800 \text{ m s}^{-1}$. Les paramètres pour la vitesse de déflagration correspondent à ceux déterminés en section 11.4, à savoir $b = 2300 \text{ m s}^{-1}$ et $n = 3.5$. L’évolution moyenne de la vitesse de choc, ainsi que celle de son intervalle de confiance, sont présentées en figure 11.20. On peut ainsi constater que la dispersion statistique associée à la représentation de la microstructure est faible. Au début de la propagation de l’onde de choc, l’intervalle de confiance associé à la vitesse de choc est inférieure à 50 m s^{-1} . À proximité de la profondeur de transition, le maximum de dispersion est observé avec des valeurs allant jusqu’à 600 m s^{-1} . Cela s’explique par le fait qu’à

cet endroit, une petite variation spatiale s'accompagne d'une forte variation de vitesse du choc. En régime établi, l'intervalle de confiance est plus faible, mais tend à augmenter avec des valeurs inférieures à 300 m s^{-1} . Cela est dû au fait qu'après la transition en détonation, les vitesses de choc oscillent autour de D_{CJ} . Ces oscillations tendent à s'amplifier à mesure que l'onde de choc se propage à l'extrémité du coin.

TABLE 11.3 – Propriétés morphologiques des cent microstructures équivalentes générées.

Nombre de grains	$\overline{d_{eq}}(\mu\text{m})$	$\sigma_{d_{eq}}(\text{mm})$	$\overline{S/V}(\text{mm}^{-1})$	$\sigma_{S/V}(\text{mm}^{-1})$
45000	162 ± 0.3	38.65 ± 0.36	30.61 ± 0.03	14.5 ± 0.38

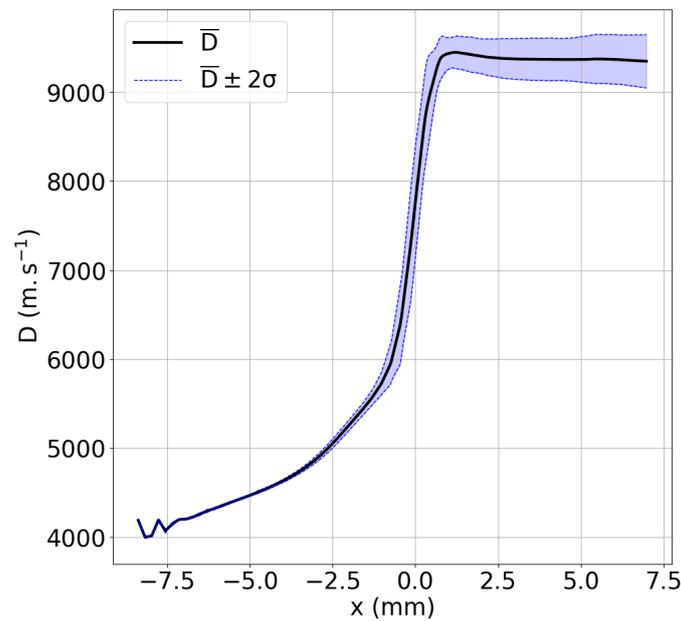


FIGURE 11.20 – Évolutions spatiale de la vitesse du choc moyenne et de son intervalle de confiance obtenues pour cent microstructures.

Au vu de ces résultats, la dispersion statistique induite par la microstructure reste faible lors de la Transition Choc-Détonation. L'étude de la TCD réalisée précédemment sur une seule microstructure est donc représentative des microstructures avec des propriétés semblables.

11.7 Retour sur l'hypothèse de courbe unique

Pour déterminer le jeu de paramètres de la vitesse de déflagration du HMX, nous avons utilisé comme donnée de référence le Pop-Plot du HMX comprimé, tracé dans le plan (x, D) . Cependant, la représentation du Pop-Plot dans ce plan suppose que l'hypothèse de courbe unique est vérifiée. Bien que nous ayons montré la validité de cette hypothèse pour des vitesses de déflagration constantes, rien ne garantit que celle-ci soit transposable à des vitesses de déflagration dépendantes de la pression. Il est donc nécessaire de l'étudier dans ce nouveau contexte.

Pour cela, des simulations ont été réalisées sur une microstructure à $\overline{d_{eq}} = 162 \mu\text{m}$, et pour des vitesses d'impact allant de 500 m s^{-1} à 1400 m s^{-1} . Ces simulations ont été réalisées avec un paramètre $b = 2300 \text{ m s}^{-1}$ et pour plusieurs valeurs de n , allant de 2.0 à 3.5. L'évolution spatiale de la vitesse du choc issue de ces simulations est tracée dans le référentiel de transition. Les résultats sont présentés en Figure 11.21.

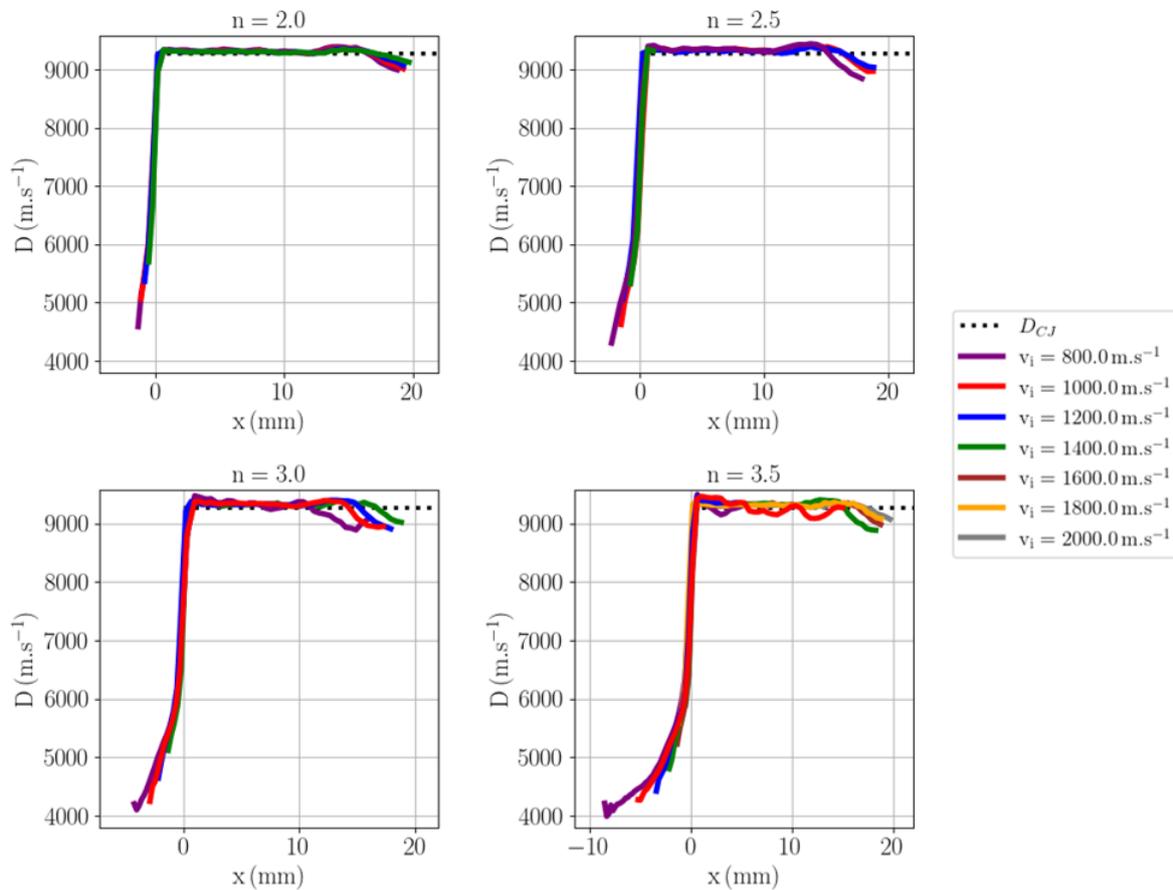


FIGURE 11.21 – Influence de la vitesse d'impact sur l'évolution spatiale de la vitesse du choc pour trois valeurs du coefficient n . Les profils ont été recalés dans le référentiel tel que $D(x = 0 \text{ mm}) = 8000 \text{ m s}^{-1}$. La microstructure employée a un diamètre équivalent moyen de $\overline{d_{eq}} = 162 \mu\text{m}$.

On peut ainsi observer que, pour toutes les valeurs de n , les différents profils de vitesse de choc se superposent *quasi* parfaitement. Quelques divergences sont cependant à relever, principalement au début de la propagation de l'onde de choc. Au bout d'une certaine distance, les différents profils d'évolution de la vitesse du choc convergent néanmoins vers une même courbe. Par conséquent, même si l'hypothèse de courbe unique de transition n'est pas parfaitement vérifiée, elle fournit une très bonne approximation de l'évolution de la vitesse de choc. Pour un coefficient $n = 3.5$, la vitesse du choc tend à osciller autour de D_{CJ} , ce qui n'est pas observé pour des valeurs de n plus faibles. Pour des coefficients n compris entre 2.0 et 3.0, une décroissance de la vitesse du choc est observée à la fin des simulations.

Ces résultats sur l'hypothèse de la courbe unique ont été réalisés sur une microstructure avec une granulométrie grossière par rapport à celle du HMX comprimé. Des simulations ont donc été réalisées sur la microstructure de diamètre équivalent moyen $\overline{d_{eq}} = 48.8 \mu\text{m}$, pour une vitesse d'impact comprise entre 1600 m s^{-1} et 2000 m s^{-1} . Les paramètres employés pour la vitesse de déflagration sont ceux obtenus en section 11.4, à savoir $b = 690 \text{ m s}^{-1}$ et $n = 3.5$. Les profils de vitesse du choc, dans le référentiel de transition, sont représentés en figure 11.22. Contrairement aux résultats précédents, les divergences observées en début de propagation du choc ne sont plus visibles. De même, les oscillations présentes en figure 11.21 pour des vitesses de choc proches de D_{CJ} ne sont plus observées.

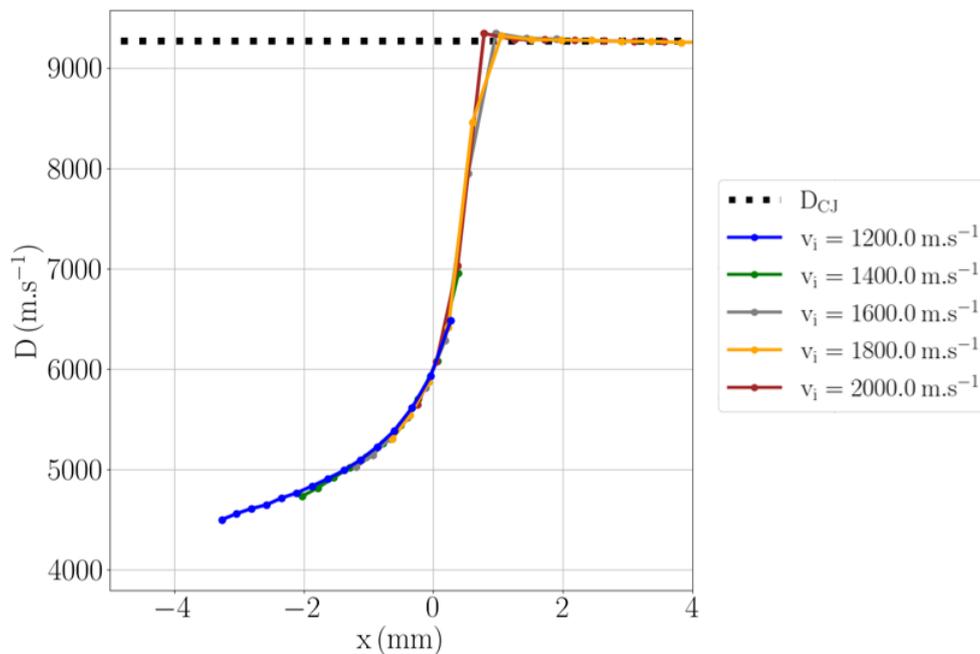


FIGURE 11.22 – Influence de la vitesse d'impact sur l'évolution spatiale de la vitesse du choc. Les profils ont été recalés dans le référentiel tel que $D(x = 0 \text{ mm}) = 6000 \text{ m s}^{-1}$. La microstructure employée a un diamètre équivalent moyen de $\overline{d_{eq}} = 48.8 \mu\text{m}$.

11.8 Synthèse

L'un des pré-requis à la simulation numérique de la TCD à l'échelle mésoscopique est de disposer d'une cinétique chimique pour chacune des phases constituant l'explosif considéré. Dans le cadre de cette thèse, un modèle réactif de régression de surface est employé afin de représenter cette cinétique chimique. L'objectif de ce chapitre a été de déterminer la capacité du modèle réactif à restituer la TCD du HMX comprimé avec une vitesse de déflagration dépendante de la pression et, dans le cas échéant, d'en identifier un jeu de paramètres.

Le modèle réactif de régression de surface nécessite deux données d'entrée lors des simulations numériques : la microstructure de l'explosif et la loi de vitesse de déflagration des cristaux énergétiques. Or, à l'heure actuelle, peu d'informations sont disponibles dans la littérature concernant la vitesse de déflagration de cristaux de HMX. Pour des pressions de l'ordre du GPa, les vitesses de déflagration sont généralement mesurées en enclume diamant sur du HMX comprimé, et sont davantage représentatives d'une vitesse de déflagration macroscopique.

Ainsi, dans un premier temps, les simulations ont été réalisées avec les données issues de la littérature. Cependant, le modèle réactif employé avec ces données ne permet pas de reproduire correctement le Pop-Plot expérimental. Dans l'optique de déterminer un jeu de paramètres plus adapté, l'influence des différents paramètres de la loi de vitesse de déflagration sur l'évolution spatiale de la vitesse du choc dans l'explosif a été étudiée sur une microstructure grossière. À l'instar des simulations réalisées à vitesse de déflagration constante, la phénoménologie de la TCD a également été étudiée pour deux jeux de paramètres. Nous avons ainsi montré que, selon les paramètres employés pour la loi de vitesse de déflagration, l'accélération du choc lors de la TCD est : soit très progressive et induite par les réactions dans tout l'écoulement aval au front de choc, soit pilotée par des réactions très locales apparaissant en champ proche du front de choc. Dans ce dernier cas, la transition du choc en détonation est alors plus violente. En comparant les profils obtenus au Pop-Plot expérimental du HMX comprimé tracé dans le plan (x, D) , un jeu de paramètres pour la vitesse de déflagration des cristaux de HMX a été identifié. Ces résultats ont permis de montrer la capacité du modèle à reproduire le Pop-Plot expérimental du HMX comprimé.

Des relations d'équivalence permettant d'exprimer la vitesse de déflagration pour obtenir des évolutions de vitesse de choc similaires pour deux microstructures ont été déterminées. Elles ont ensuite été appliquées à une microstructure représentative du HMX comprimé afin d'obtenir un jeu de paramètre adapté pour la vitesse de déflagration du HMX.

Les résultats précédents ont été obtenus sous l'hypothèse de la courbe unique. Afin de vérifier la validité de cette hypothèse, des simulations numériques ont été réalisées à différentes vitesses d'impact. Bien que les courbes de vitesse de choc obtenues présentent de légères divergences, en particulier aux premiers instants suivant l'impact de la plaque d'aluminium sur l'explosif, le principe de courbe unique de transition permet tout de même d'obtenir une très bonne approximation du comportement du choc dans l'explosif. Il a également été montré que, plus la microstructure employée est grossière, plus les divergences entre les différentes courbes de

vitesses de choc sont marquées. Pour une microstructure représentative du HMX comprimé, ces divergences deviennent négligeables. L'hypothèse d'une courbe unique est donc pertinente, ce qui permet de confirmer les résultats présentés ci-dessus.

Cette approche pourrait permettre d'explorer de nouvelles pistes afin de déterminer la surface réactive nécessaire pour restituer la TCD. En effet, si l'on suppose que les données issues de Boggs *et al.* [16] et Atwood *et al.* [140], obtenues pour des cristaux de HMX, sont généralisables aux pressions rencontrées lors de la TCD, alors il devient possible de quantifier l'excès et le manque de surface réactive induite par le modèle de régression de surface.

Conclusions

Cette thèse s'inscrit dans la lignée des travaux visant à prédire la sensibilité au choc des explosifs à partir de simulations numériques réactives à l'échelle mésoscopique. Ce faisant, les modèles macroscopiques de TCD, plus adaptés aux géométries importantes, pourraient être élaborés par le biais d'une approche numérique. Un objectif supplémentaire est d'améliorer la compréhension des phénomènes physiques mis en jeu lors de la mise en détonation d'un explosif suite à un impact. Dans cette optique, un modèle réactif à l'échelle mésoscopique a été proposé et ces travaux ont montré sa viabilité à partir de simulations eulériennes réalisées à l'échelle mésoscopique.

La première partie de cette thèse présente une étude bibliographique autour de la sensibilité au choc d'un explosif et, plus spécifiquement, de la transition choc-détonation.

Les principaux mécanismes identifiés comme potentiellement responsables de l'apparition de points chauds ont d'abord été présentés (chapitre 2). Dans ce contexte, des études expérimentales permettant une observation directe des points chauds émergent. Parmi elles, les travaux de Johnson *et al.* [9, 10] suggèrent que les points chauds apparaissent en surface des cristaux énergétiques et que les réactions chimiques se propagent ensuite selon un régime de déflagration. Les notions relatives à la construction du Pop-Plot, représentant l'évolution de la profondeur de transition en fonction de la pression d'impact, ont ensuite été introduites (chapitre 3). L'hypothèse de la courbe unique de transition a également été abordée. Une réflexion a été menée visant à établir les conséquences de la validité de l'hypothèse de courbe unique de transition sur l'interprétation du Pop-Plot et de sa signification vis-à-vis de la sensibilité au choc des explosifs. Le Pop-Plot a ainsi été réinterprété comme l'évolution spatiale de la pression au choc. Ces discussions ont également souligné le besoin crucial d'uniformisation des pratiques, en particulier au regard du critère choisi pour marquer la transition du choc en détonation. Elles ont également mis en exergue le fait qu'une vérification systématique de l'hypothèse de courbe unique lors de la construction des Pop-Plots permettrait de disposer d'informations plus riches sur la sensibilité au choc des compositions. Enfin, après une description succincte des modèles macroscopiques de TCD, les travaux basés sur une modélisation mésoscopique ont été abordés plus en détail (chapitre 4). Ces derniers peuvent être classés selon deux approches complémentaires : les études portant sur la formation des points chauds et celles portant sur la TCD. Les premières ont pour objectif d'évaluer les mécanismes susceptibles d'entraîner l'apparition de points chauds dans l'explosif suite au passage d'un choc. À l'heure actuelle, la majorité de ces études est réalisée sans modélisation de la réactivité de l'explosif et la transition du choc en détonation n'est pas abordée. Les mécanismes étudiés sont variés, allant de la friction aux contacts intergranulaires. Dans la deuxième approche, les études se focalisent sur la TCD. Cependant, les travaux réalisés à ce jour portent essentiellement sur le mécanisme de formation de points chauds par effondrement de pores. Les modèles réactifs employés sont souvent issus de modèles réactifs macroscopiques, qui contiennent déjà implicitement des mécanismes de formation de points chauds, ce qui induit parfois un comportement inductif de la TCD, davantage représentatif d'un explosif homogène.

À partir de cet état de l'art, une méthodologie a été développée (chapitre 5) afin de réaliser des simulations mésoscopiques. L'hypothèse de la courbe unique est employée afin de permettre la comparaison des résultats au Pop-Plot expérimental à partir d'une seule simulation. Les observations expérimentales de Johnson *et al.* [9, 10], quant à elles, ont été exploitées afin de proposer un modèle réactif de régression de surface appliqué à l'échelle mésoscopique. Il nécessite deux données d'entrée : la microstructure de l'explosif et une loi pour la vitesse de déflagration des cristaux énergétiques. L'avantage de ce modèle réactif est qu'il décrit la propagation des fronts de déflagration à partir d'une population initiale de points chauds. Le processus de formation des points chauds n'est pas traité.

La deuxième partie de ce manuscrit introduit la chaîne de calcul développée pour réaliser les simulations mésoscopiques. Les microstructures sont générées *via* le logiciel *Neper* [131], puis caractérisées morphologiquement (chapitre 6). Le maillage est réalisé avec le logiciel *GMSH* [133] pour décrire la géométrie dans le code de calcul OURANOS [130]. La configuration des simulations numériques est également détaillée (chapitre 7). Deux algorithmes ont été développés pour implémenter le modèle réactif de régression de surface : le premier est basé sur la méthode de Youngs [142] et le second sur la méthode de propagation des fronts d'ondes. Une validation de ces deux algorithmes a ensuite été réalisée sur un cas test élémentaire. Une comparaison des résultats obtenus avec les deux algorithmes a été effectuée pour des simulations mésoscopiques. Bien que la méthode de propagation des fronts d'ondes ait montré une très bonne concordance avec la prédiction théorique dans le cadre du cas test, son application à la configuration d'intérêt s'est révélée inadaptée. La méthode de Youngs a donc été employée par la suite. Enfin, les outils de post-traitement ont été présentés.

La dernière partie de ce manuscrit présente les résultats des simulations réalisées avec le modèle réactif de régression de surface appliqué au HMX comprimé. Les premières simulations ont été réalisées avec des vitesses de déflagration constantes et des microstructures monomodales afin d'évaluer la capacité du modèle à traiter la transition d'un choc en détonation (chapitre 10). Dans ce contexte, une étude de la phénoménologie a été établie et l'influence de la vitesse de déflagration et de la granulométrie de l'explosif sur l'évolution de la vitesse de choc a ensuite été étudiée. Une relation d'équivalence, basée sur le rapport de la vitesse du front de déflagration et du facteur de forme, a été identifiée permettant d'obtenir une évolution similaire de la vitesse du choc pour des microstructures ayant des granulométries différentes. À partir de simulations réalisées à différentes vitesses d'impact, il a pu être montré que l'hypothèse de courbe unique de transition était vérifiée pour le modèle réactif de régression de surface employé avec une vitesse de déflagration constante et une microstructure monomodale. Cette approche simplifiée a permis de montrer que, pour des vitesses de déflagration constantes, les simulations mésoscopiques permettent d'observer une transition du choc à la détonation. Cependant, la comparaison de l'évolution spatiale de la vitesse du choc au Pop-Plot expérimental du HMX comprimé a montré que l'utilisation d'une vitesse de déflagration constante appliqué à une microstructure monomodale ne permettait pas de modéliser la sensibilité au choc du HMX comprimé.

Afin d'obtenir une meilleure modélisation de la TCD, une vitesse de déflagration dépendante de la pression (similaire à la loi de Vieille) et plus représentative des données de la littérature, a

été utilisée (chapitre 11). Cependant, le modèle réactif de régression de surface basé sur les vitesses de déflagration issues de la littérature n'a pas permis de reproduire le Pop-Plot expérimental du HMX comprimé. En conséquence, une relation $D_f(P)$ permettant de reproduire la sensibilité au choc du HMX comprimé a été identifiée avec une microstructure grossière. Au préalable, une étude de la phénoménologie a été menée pour deux jeux de paramètres extrêmes. Cette étude a montré que, selon les paramètres employés, l'accélération du choc lors de la TCD est : soit très progressive et induite par les réactions dans tout l'écoulement aval au front de choc, soit pilotée par des réactions très locales apparaissant en champ proche du choc. La relation d'équivalence entre les microstructures, développée pour les vitesses de déflagration constantes, a ensuite été étendue aux vitesses de déflagration dépendantes de la pression. La relation identifiée a ainsi pu être adaptée pour une microstructure représentative du HMX comprimé. La comparaison de cette relation aux données de la littérature a permis de mettre en évidence que l'amorçage de la surface entière des cristaux induit un excès de surface réactive pour les faibles pressions ($P < 12$ GPa) et un déficit à haute pression. Enfin, l'hypothèse de courbe unique a été vérifiée pour les vitesses de déflagration dépendantes de la pression. Les résultats indiquent que l'hypothèse de courbe unique fournit une très bonne approximation des profils de vitesse de choc.

Bien que nous ayons qualifié le modèle réactif de « modèle de régression de surface », il s'agit plus précisément d'un modèle de propagation de front de déflagration. Dans le cadre de cette thèse, il a été appliqué aux contours des cristaux de HMX. Ainsi, les mailles situées à la surface des cristaux étaient détectées afin d'activer les réactions chimiques. Une fois l'activation des réactions chimiques réalisée, le modèle réactif propage un front de déflagration. Ce modèle réactif est ainsi apte à traiter tout type de populations de points chauds (pores, fissures suite à un endommagement, bandes de cisaillement, etc.). À titre d'exemple, des simulations numériques pourraient être réalisées avec l'hypothèse que les points chauds sont localisés au niveau des pores ou des fissures, et que la décomposition du matériau énergétique à l'échelle du grain est réalisée selon la propagation d'un front de déflagration. Le seul pré-requis nécessaire serait alors de disposer de critères d'activation qui permettent d'initier les réactions chimiques. Les simulations mésoscopiques traitant de la formation des points chauds pourraient alors permettre d'alimenter ces critères.

Le modèle réactif de propagation de front de déflagration semble donc prometteur pour modéliser la TCD des explosifs à l'échelle mésoscopique. Outre la prédiction de la sensibilité au choc d'un explosif, il pourrait fournir une base théorique pour mieux comprendre comment les réactions chimiques dans l'explosif contribuent à l'accélération du choc. Pour clôturer cette conclusion, nous insisterons sur le besoin d'uniformisation des pratiques vis-à-vis de la TCD. Sans convention établie, des incertitudes risquent de persister lors de l'exploitation des données expérimentales disponibles. Un enjeu primordial réside également dans la vérification systématique de l'hypothèse de courbe unique lors de la caractérisation de la sensibilité des explosifs, qui permettrait d'obtenir des informations plus riches sur la sensibilité des explosifs. Comme nous avons pu le voir au cours de cette thèse, si l'existence d'une courbe unique venait à être démontrée, cela pourrait mener à une transformation profonde des pratiques et de la compréhension que l'on a de la sensibilité au choc des explosifs.

Perspectives

Les perspectives abordées ci-dessous sont présentées par ordre de priorité, à l'exception de celle traitant de l'identification d'une frontière sonique, qui est une piste de recherche en soi et peut être traitée parallèlement aux autres.

Améliorations du modèle réactif

Les travaux menés ont permis de montrer la pertinence d'un modèle réactif de propagation de front de déflagration. Dans le cadre de cette thèse, il a été appliqué aux contours des cristaux énergétiques de HMX et toute leur surface est amorcée suite à la propagation du choc. Cependant, les résultats obtenus à l'issue du chapitre 11 montrent que cela induit un excès de surface réactive pour des pressions de choc faibles et un déficit à haute pression. Une voie d'amélioration du modèle réactif serait de permettre un amorçage partiel des contours des grains afin d'éviter un excès de surface réactive à basse pression et d'intégrer d'autres populations de points chauds afin de compenser le déficit de surface réactive à pression élevée.

Dans cette optique, il est envisagé :

- d'introduire un modèle d'endommagement afin de modéliser la fissuration des cristaux ;
- de déterminer des seuils d'activation des réactions en lien avec les propriétés morphologiques des cristaux.

Des travaux de thèse sont actuellement menés par Camille Robin au CEA Gramat sur la formation des points chauds et devraient permettre d'évaluer/d'alimenter les seuils d'activation des points chauds à la surface et l'intérieur des cristaux. Il nous semble primordial que ces améliorations soient réalisées en limitant au maximum le nombre de paramètres numériques employés. Cet effort nous paraît nécessaire afin de conserver une modélisation simple mais physique, et afin d'éviter que ceux-ci ne se transforment en paramètres d'ajustement, à l'instar de ce qui est fait dans les modèles de troisième génération (voir section 4.1.3).

Les travaux de Kaeshammer [27] et d'Handley [30] ont montré l'importance des effets dimensionnels sur les résultats des simulations. Une perspective supplémentaire est donc l'extension du modèle réactif à des configurations tridimensionnelles.

Il serait également souhaitable d'améliorer l'algorithme de reconstruction du front de déflagration. Au cours de cette thèse, deux algorithmes ont été implémentés et l'algorithme basé sur la méthode de Youngs a été employé lors des simulations numériques. L'implémentation d'un algorithme basé sur une méthode des surfaces de niveau [152] (*Level-Set*), devrait permettre de corriger les imperfections de l'algorithme basé sur la méthode actuelle et permettre une meilleure reconstruction du front de déflagration.

De même, il serait souhaitable de pouvoir travailler avec un équilibre (h, P) au lieu de l'équilibre (P, v) entre les produits et les réactifs. L'emploi d'une équation d'état de type BKS [153]

au lieu de l'équation d'état JWL pour les produits de détonation serait également à explorer.

Passage à un explosif composite

Dans ces travaux de thèse, le HMX comprimé a été choisi comme matériau d'étude et une méthodologie a été développée afin de déterminer une relation pour sa vitesse de déflagration. Pour des explosifs de type PBX^b, la principale difficulté est de déterminer la réactivité du liant.

Dans ce contexte, la stratégie envisagée pour déterminer la réactivité des cristaux énergétiques et du liant est la suivante :

- détermination de la vitesse de déflagration des cristaux énergétiques afin de restituer le Pop-Plot expérimental d'un comprimé constitué uniquement de ces cristaux (comme du HMX comprimé) ;
- détermination de la réactivité du liant afin de restituer le Pop-Plot expérimental d'une composition avec une proportion importante de liant ;
- réalisation de simulations mésoscopiques d'une troisième composition, avec une proportion de liant et de cristaux différente, afin de valider la capacité prédictive de cette approche.

Une telle étude requiert la connaissance détaillée des informations microstructurales des compositions étudiées. Une illustration de cette stratégie, appliquée aux explosifs de type LX à base de HMX et de Viton, est présentée en figure 11.23.

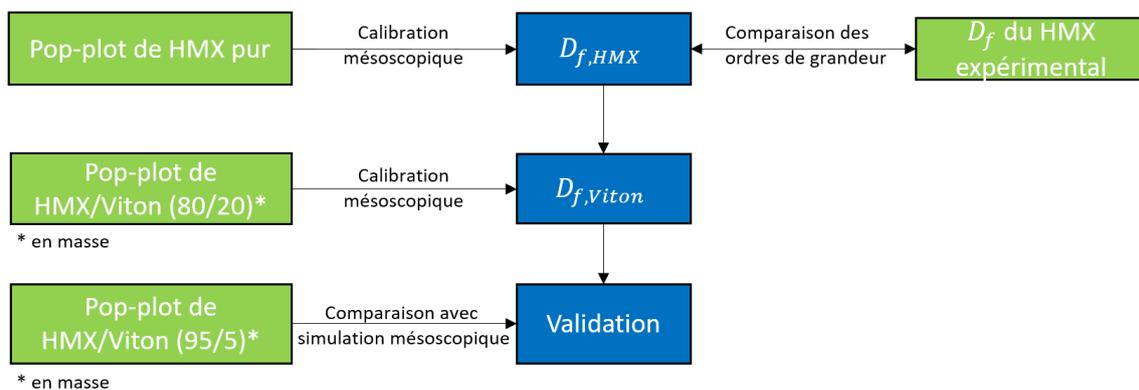


FIGURE 11.23 – Illustration de la stratégie envisagée pour le couple HMX/Viton.

Les modèles mésoscopiques ont vocation à alimenter des modèles macroscopiques de TCD, plus adaptés à la simulation de géométries de grandes dimensions. L'objectif principal est donc de déterminer les paramètres d'un modèle réactif macroscopique à partir des simulations mésoscopiques. Réaliser une simulation macroscopique avec un modèle réactif déterminé à partir de l'approche mésoscopique permettrait alors de valider la méthode d'extraction de la cinétique macroscopique.

b. Pour rappel, l'intégration du liant dans les microstructures a été implémentée (section 6.1.2).

Étude de l'influence des propriétés morphologiques

À terme, la modélisation à l'échelle mésoscopique devrait permettre d'explorer l'influence des propriétés microstructurales de l'explosif. Cela permettrait non seulement de mieux comprendre les paramètres influant sur la TCD mais aussi d'explorer de nouvelles voies de conception de munitions à l'image des travaux de Olsen *et al.* [122] sur les compositions à taux de chargement variable.

Plusieurs aspects peuvent ainsi être explorés :

- Dans le cadre de cette thèse, nous avons étudié l'influence du diamètre moyen sur la TCD pour des vitesses de déflagration constante. De nombreuses pistes peuvent également être étudiées : influence d'autres indicateurs statistiques que la moyenne (variance, coefficient de symétrie, coefficient d'aplatissement, etc.) sur la TCD, comparaison d'une microstructure multimodale et monomodale, impact des modes d'un microstructure multimodale, etc. ;
- L'approche mésoscopique devrait permettre d'étudier la présence de défauts dans les microstructures et d'évaluer leur impact sur la TCD. À titre d'exemple, dans le cas d'explosifs de type PBX, la présence d'agrégats de cristaux pourrait influencer la transition du choc en détonation. Inversement, l'absence locale de cristaux (« agrégat de liant ») pourrait également influencer la TCD.
- Dans les travaux réalisés par Olsen *et al.* [122], un certain nombre de configurations microstructurales d'intérêt pour l'étude de compositions à taux de chargement variable avaient été mentionnées. Parmi elles, l'étude des compositions à granulométrie variable serait particulièrement pertinente avec le modèle réactif de propagation de fronts de déflagration.

Identification d'une frontière sonique

Dans la section 3.2, nous avons évoqué le développement d'une frontière sonique comme marqueur de la transition du choc en détonation. Dans la théorie classique de la détonation, cette notion est définie pour des milieux homogènes par la relation $D = u + c$. Dans le cas d'un milieu diphasique comme les explosifs hétérogènes, cette notion est plus délicate à aborder : chaque milieu possède sa propre vitesse du son et cette relation devient difficilement applicable.

Dans l'optique de répondre à ces interrogations, un détecteur de choc a été développé. Par manque de temps, il n'a pu être employé pour le manuscrit et n'est donc mentionné ici qu'à titre de perspective. Ce détecteur est basé sur celui du modèle SURF [87] et consiste à déterminer les points situés sur les Hugoniots réactives. Il peut être appliqué aux champs des grandeurs thermodynamiques ou aux profils moyens. En déterminant les points du diagramme (P, v) situés à l'état CJ, il pourrait être possible de déterminer la formation d'une frontière sonique. La détermination d'une frontière sonique à l'échelle homogène pour un milieu diphasique pourrait également être étudiée en appliquant le détecteur sur les profils moyens. Cela soulève cependant des interrogations quant aux opérateurs de moyenne à employer (voir section 9.2). La figure 11.24.a

illustre un exemple du diagramme (P, v) obtenu avec le détecteur de choc sur les profils moyens à différents instants d'une simulation mésoscopique. On peut voir que les points de l'Hugoniot inerte sont identifiés et retracent l'évolution de la pression au front de choc. Cependant, aucun point des Hugoniots réactives n'a pu être identifié. La figure 11.24.b présente le diagramme (P, v) obtenu sur l'ensemble des champs de grandeurs à un instant donné de cette simulation. On retrouve ainsi la pression au front de choc sur l'Hugoniot inerte. Les points identifiés sur les Hugoniots réactives dans l'écoulement aval du choc semblent former la droite de Rayleigh. Lorsque la fraction brûlée atteint 1, les points identifiés sont situés sur la Crussard. La figure 11.24.c présente le diagramme (P, v) obtenu sur l'ensemble des champs de grandeurs à chaque instant. On peut voir que les points identifiés reforment l'Hugoniot inerte ainsi que les Hugoniots réactives.

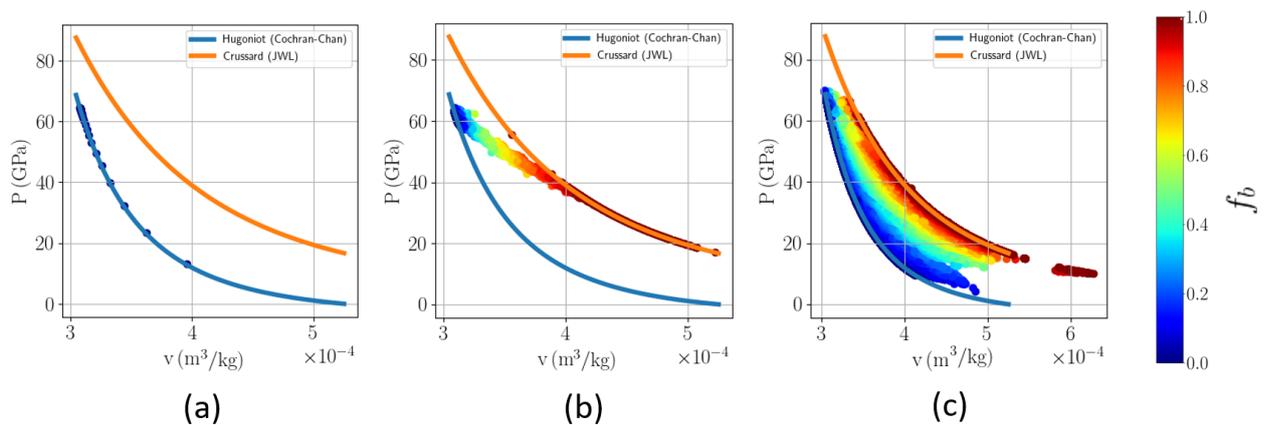


FIGURE 11.24 – Diagramme (P, v) élaboré avec le détecteur de choc (a) à partir des profils moyens des grandeurs thermodynamiques pour plusieurs instants d'une simulation, (b) à partir des champs des grandeurs thermodynamiques à un instant donné d'une simulation, (c) à partir des champs des grandeurs thermodynamiques pour plusieurs instants de la simulation.

Une voie alternative au détecteur de choc serait d'employer la méthode des caractéristiques^c pour déterminer l'apparition de la frontière sonique. Cependant, encore une fois, l'utilisation de cette méthode devient délicate pour des milieux contenant plusieurs phases, et donc plusieurs valeurs de vitesse du son. Son application à une modélisation macroscopique équivalente devrait néanmoins permettre une meilleure compréhension des phénomènes en jeu. De plus, cette méthode devrait également permettre d'aborder la notion de zone d'influence (voir section 3.2). En régime établi, cette dernière devrait être confondue avec la zone de réaction délimitée par le choc d'un côté et la frontière sonique de l'autre.

c. La méthode des caractéristiques consiste à tracer les trajectoires des ondes. La formation d'une frontière sonique correspondrait alors à la convergence des trajectoires des ondes soniques en aval du front de choc. De même, la zone d'influence correspond aux trajectoires des ondes soniques qui atteignent le front de choc au cours de la TCD.

Critères de détection développés par le laboratoire de Georgia Tech

Cette annexe décrit les trois critères de détection de points chauds employés au sein du laboratoire de Georgia Tech pour étudier leur formation dans le cadre de simulations réalisées avec une modélisation inerte de l'explosif (voir section 4.2.2) :

- Le critère de la loupe ;
- Le critère de la RDF (*Radial Distribution Function*) ;
- Le critère de température seuil.

Ces trois critères sont présentés dans l'ordre chronologique.

Ainsi, le premier algorithme de détection (critère de la loupe), développé par Barua *et al.* [98] en 2012, consiste à parcourir la microstructure de l'explosif à chaque pas de temps de la simulation grâce à une "loupe" pour détecter les zones où la température est plus élevée que dans la zone environnante. Une illustration de la loupe est disponible en Figure A.1. Un point chaud est détecté si la température moyenne T_i dans le cercle intérieur (de diamètre d_i) est supérieure à la température moyenne T_{anneau} de la région annulaire $[d_i; d_o]$ d'une valeur seuil ΔT_{seuil} . Soit :

$$\overline{T}_i > \overline{T_{anneau}} + \Delta T_{seuil} \Rightarrow \text{le cercle de rayon } d_i \text{ est détecté comme étant un point chaud} \quad (\text{A.1})$$

Le diamètre du cercle extérieur est pris tel que $d_o = 2d_i$, et une convergence sur le nombre de points chauds détectés est réalisée pour déterminer la valeur de d_i et de ΔT_{seuil} . Elle est fixée par la suite à $d_i = 60 \mu\text{m}$ et $\Delta T_{seuil} = 20 \text{K}$. Cette valeur peut néanmoins générer un biais dans le traitement des points chauds. Dans le contexte d'une sollicitation par une onde de choc, les différences d'impédance acoustique entraînent une différence de température entre les phases. Ainsi, avec une température seuil trop faible, il est possible que la détection des points chauds retranscrive cette différence d'impédance plutôt que la présence de sites potentiels de réactions chimiques.

Ce critère est ensuite remplacé par l'utilisation d'une fonction de distribution radiale (ou RDF) [99]. Ce nouvel algorithme de détection consiste à parcourir la microstructure pour trouver les zones où la température est supérieure à ΔT_{seuil} . Chacune de ces zones est alors analysée

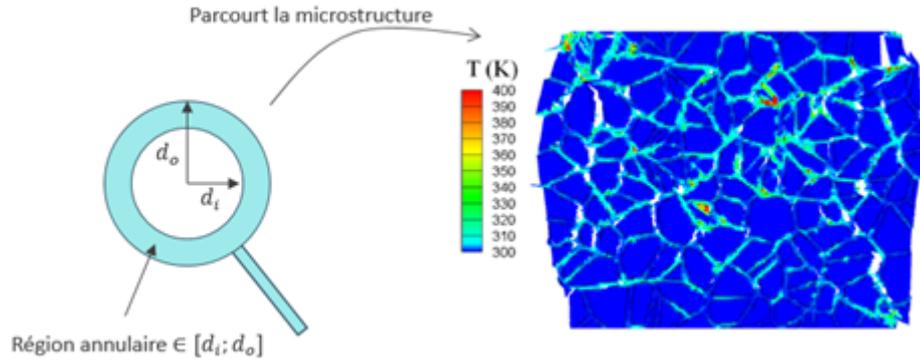


FIGURE A.1 – Schéma de principe du critère de la "loupe" développé par Barua et al.[98].

grâce à la RDF afin de déterminer la taille du point chaud. Cette analyse consiste à déterminer, pour chaque rayon r , la RDF $f(r)$ correspondant au rapport entre le nombre de mailles ayant une température supérieure à ΔT_{seuil} dans le cercle de rayon r et le nombre de mailles ayant une température supérieure à ΔT_{seuil} dans la région comprise entre r et $r + dr$. Une illustration schématique, issue de [99] est disponible en Figure A.2. On aboutit ainsi à une densité de probabilité qui permet de calculer le rayon du point chaud considéré : on recherche la première valeur de r pour laquelle $f(r) = 0$, soit le premier rayon pour lequel on ne trouve aucun point chaud dans l'anneau de rayon $r + dr$. Cela permet d'analyser le champ de température de la microstructure en faisant varier la valeur de ΔT_{seuil} , ou de sélectionner uniquement les points chauds d'intérêt en choisissant sa valeur judicieusement.

Ce nouveau critère permet de s'émanciper du paramètre d_i du critère "loupe".

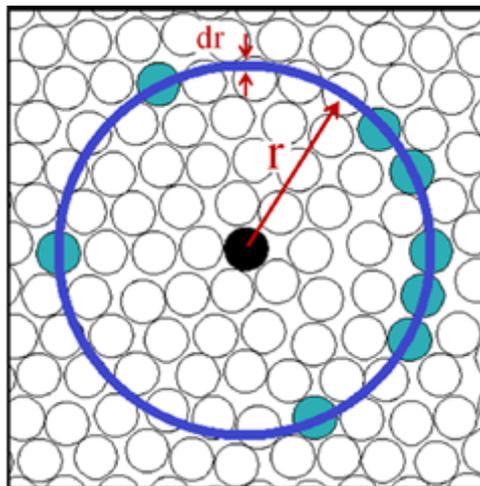


FIGURE A.2 – Schéma de principe du critère de la RDF issue de Barua *et al.*[100].

Le développement du critère de détection des points chauds utilisant la RDF a été réalisé conjointement avec un critère de détermination de criticité des points chauds. Ce critère est basé sur les travaux de Tarver sur le diamètre critique des points chauds, déterminé pour différentes températures [154]. Ainsi, un point chaud est considéré comme étant critique si son diamètre est supérieur au diamètre critique déterminé par Tarver :

$$d(T) \geq d_c(T) \quad (\text{A.2})$$

avec d le diamètre du point chaud, T sa température, et $d_c(T)$ le diamètre critique d'un point chaud à la température T . Le diamètre du point chaud $d(T)$ est obtenu par le critère de détection de la RDF et est ensuite comparé aux diamètres critiques établis par Tarver et al. [154]. La température d'un point chaud n'étant pas homogène, T correspond à la température minimale à l'intérieur du point chaud. Afin de tenir compte de cette hétérogénéité, une incertitude de 10% est attribuée au diamètre critique déterminé par Tarver et al. [154] : un point chaud est donc réellement considéré comme critique si $d(T) \geq 0.9d_c(T)$.

Avec les travaux de Kim *et al.* [103], une nouvelle méthode de détection des points chauds est développée. Une température seuil est employée afin d'obtenir une carte binaire des points chauds tels que $T > T_{seuil}$. Chaque zone de cette carte binaire définit alors un point chaud. Le diamètre d'un point chaud est ensuite déterminé comme le diamètre du cercle de même surface que le point chaud.

Les critères de détection permettent d'identifier les points chauds aussi bien dans les grains énergétiques que dans le liant. Il semblerait toutefois que la détection ne soit réalisée que dans les grains énergétiques [105], même si ce n'est parfois pas mentionné explicitement [99, 101, 103, 110]. La détermination du diamètre critique réalisée dans le travail de Tarver considère uniquement des points chauds dans des cristaux de HMX et de TATB [154]. Ainsi, si les critères de détection sont employés sans distinguer les différentes phases, leur utilisation combinée à celui de la criticité peut engendrer un biais dans les résultats obtenus : des points chauds présents dans le liant peuvent alors être détectés comme étant critiques. Les réactions chimiques résultant de l'augmentation de température dans le liant devraient être moins importantes que dans les cristaux énergétiques, et la valeur des diamètres critiques s'en trouvera modifiée. Le nombre de points chauds détectés seraient donc, a priori, surestimé par l'emploi combiné de ces critères.

Microstructures employées dans la littérature

TABLE B.1 – Microstructures artificielles employées dans la littérature (partie 1).

Source	Nombre de modes	f_v^a	Propriétés morphologiques	N_e^b	Dimensions	Méthode de génération
Baer <i>et al.</i> [94] (2002)	Monomodale	≈ 0.65	$\bar{d} \approx 146 \mu\text{m}$	1	Inconnues	Basée sur la méthode de Monte-Carlo et des simulations de collision de dynamique moléculaire
		0.68	$\bar{d} \approx 146 \mu\text{m}$	1	$1.2 \text{ mm} \times 1.2 \text{ mm} \times 0.9 \text{ mm}$	
		≈ 0.65	$\bar{d} \approx 100 \mu\text{m}$	1	Inconnues	Arrangement ordonné de sphères/cubes
Barua <i>et al.</i> [97] ^c (2011)	Monomodale	0.42	$\bar{d} = 205 \mu\text{m}$ $\bar{\sigma} = 69.4 \mu\text{m}$	1	$3 \text{ mm} \times 3 \text{ mm}$	Inconnue
		0.69	$\bar{d} = 208 \mu\text{m}$ $\bar{\sigma} = 47.13 \mu\text{m}$	1		
		0.74	$\bar{d} = 207 \mu\text{m}$ $\bar{\sigma} = 43.42 \mu\text{m}$	1		
		0.69	$\bar{d} = 255 \mu\text{m}$ $\bar{\sigma} = 56.6 \mu\text{m}$	1		
	Bimodale	0.69	$\bar{d}_1 = 294 \mu\text{m}; \bar{d}_2 = 50.0 \mu\text{m}$ $\bar{\sigma}_1 = 98 \mu\text{m}; \bar{\sigma}_2 = 16.0 \mu\text{m}$	1		
Barua <i>et al.</i> [98] ^c (2012)	Monomodale	0.69	$\bar{d} \in [203.6 \mu\text{m}; 222.4 \mu\text{m}]$ $\bar{\sigma} \in [86.6 \mu\text{m}; 111.4 \mu\text{m}]$	6	$3 \text{ mm} \times 3 \text{ mm}$	Tessellation de Voronoï
Barua <i>et al.</i> [99] ^c (2013)	Monomodale	0.70	$\bar{d} = 120 \mu\text{m}$	3	$3 \text{ mm} \times 3 \text{ mm}$ et $15 \text{ mm} \times 3 \text{ mm}$	Inconnue
		0.70	$\bar{d} = 360 \mu\text{m}$	3		
	Bimodale	0.82	$\bar{d}_1 = 360 \mu\text{m}; \bar{d}_2 = 120 \mu\text{m}$	3		
		0.60	$\bar{d}_1 = 360 \mu\text{m}; \bar{d}_2 = 120 \mu\text{m}$	3		
		0.70	$\bar{d}_1 = 360 \mu\text{m}; \bar{d}_2 = 120 \mu\text{m}$	3		

a. Fraction volumique. Elle ne tient pas compte de la porosité.

b. Nombre de microstructures générées.

c. Étude portant sur la formation des points chauds.

TABLE B.2 – Microstructures artificielles employées dans la littérature (partie 2).

Source	Nombre de modes	f_v^a	Propriétés morphologiques	N_e^b	Dimensions	Méthode de génération
Kim <i>et al.</i> [101] ^c (2014)	Bimodale	0.81	$\bar{d}_1 = 289 \mu\text{m}$; $\bar{d}_2 = 123 \mu\text{m}$ $\bar{\sigma}_1 = 37.2 \mu\text{m}$; $\bar{\sigma}_2 = 49.9 \mu\text{m}$	20	$3 \text{ mm} \times 3 \text{ mm}$	Un répertoire de grains est créé à partir de tessellations de Voronoï. Ces grains sont ensuite placés aléatoirement dans la microstructure.
Kim <i>et al.</i> [102] ^c (2016)	Monomodale	1.0	$\bar{d} = 70 \mu\text{m}$	5	$6 \text{ mm} \times 3 \text{ mm}$	Tessellation de Voronoï
			$\bar{d} = 130 \mu\text{m}$	5		
			$\bar{d} = 220 \mu\text{m}$	5		
Kim <i>et al.</i> [103] ^c (2018)	Monomodale	0.81	$\bar{d} = 220 \mu\text{m}$	5	$15 \text{ mm} \times 3 \text{ mm}$	Idem que Kim <i>et al.</i> [101] (2014)
Wei <i>et al.</i> [105] ^c (2018)	Monomodale	0.81	$\bar{d} = 210 \mu\text{m}$ $\bar{\sigma} = 66 \mu\text{m}$	5	$15 \text{ mm} \times 3 \text{ mm}$	Idem que Kim <i>et al.</i> [101] (2014)
Wei <i>et al.</i> [107] (2019)	Monomodale	0.81	$\bar{d} = 207 \mu\text{m}$ $\bar{\sigma} = 60.1 \mu\text{m}$	5	$15 \text{ mm} \times 3 \text{ mm} \times 3 \text{ mm}$	Idem que Kim <i>et al.</i> [101] (2014) mais appliquée à des cas-3D
Wei <i>et al.</i> [106] ^c (2021)	Monomodale	0.81	$\bar{d} = 210 \mu\text{m}$ $\bar{\sigma} = 66 \mu\text{m}$	5	$3 \text{ mm} \times 3 \text{ mm}$	Idem que Kim <i>et al.</i> [101] (2014)
Miller <i>et al.</i> [108] (2020)	Monomodale	1.0	$\bar{d} = 229 \mu\text{m}$ $\bar{\sigma} = 79 \mu\text{m}$	5	$3 \text{ mm} \times 3 \text{ mm}$ et $5 \text{ mm} \times 1 \text{ mm}$	Tessellation de Voronoï
Miller <i>et al.</i> [109] (2020)	Monomodale	1.0	$\bar{d} = 164.7 \mu\text{m}$ $\bar{\sigma} = 67.8 \mu\text{m}$	5	$15 \text{ mm} \times 3 \text{ mm} \times 3 \text{ mm}$ et $6 \text{ mm} \times 1 \text{ mm} \times 1 \text{ mm}$	Tessellation de Voronoï

a. Fraction volumique. Elle ne tient pas compte de la porosité.

b. Nombre de microstructures générées.

c. Étude portant sur la formation des points chauds.

TABLE B.3 – Microstructures artificielles employées dans la littérature (partie 3).

Source	Nombre de modes	f_v^a	Propriétés morphologiques	N_e^b	Dimensions	Méthode de génération
Coffelt <i>et al.</i> [120] ^c (2022)	Monomodale	0.75	$\bar{d} = 150.2 \mu\text{m}$ $\bar{\sigma} = 67.3 \mu\text{m}$	5	5 mm × 1 mm × 1 mm	Une tessellation de Voronoï est réalisée à la TMD. Une homothétie avec un rapport aléatoire est ensuite réalisée sur chaque grain afin d'atteindre la fraction volumique visée.
Olsen <i>et al.</i> [122] ^c (2023)	Monomodale	0.75	$\bar{d} = 150 \mu\text{m}$ $\bar{\sigma} = 68 \mu\text{m}$	5	6 mm × 1 mm × 1 mm	Idem que Coffelt <i>et al.</i> [120] (2022)
Wang <i>et al.</i> [93] ^d (2017)	Monomodale	0.75	100 grains	1	1 mm × 1 mm × 8 μm	Tessellation de Voronoï
Choi <i>et al.</i> [123] ^c (2020)	Monomodale	0.55	$\bar{d} = 120 \mu\text{m}$	1	2 mm × 0.5 mm	Inconnue
	Monomodale	0.55	$\bar{d} = 120 \mu\text{m}$	1	3 mm × 1.3 mm × 0.6 mm	Inconnue
	Monomodale	0.95	$\bar{d} = 120 \mu\text{m}$	1	8 mm × 0.5 mm	Le liant est introduit sous forme de grain polygonaux dans un échantillon de HMX pur.
Miller <i>et al.</i> [95] ^c (2021)	Bimodale	0.95	$\bar{d}_1 = 25 \mu\text{m}$; $\bar{d}_2 = 13.78 \mu\text{m}$ $\bar{\sigma}_1 = 1.94 \mu\text{m}$; $\bar{\sigma}_2 = 1.89 \mu\text{m}$	10	1.05 mm × 0.1 mm	Tessellation de Voronoï (Logiciel ParticlePack [155])
Gallier [124] ^c (2023)	Monomodale	0.82	$\bar{d} = 170 \mu\text{m}$	3	(> 3 mm) × 1 mm	Tessellation de Voronoï

a. Fraction volumique. Elle ne tient pas compte de la porosité.

b. Nombre de microstructures générées.

c. Étude portant sur la TCD.

d. Étude portant sur la formation des points chauds.

TABLE B.4 – Microstructures issues de microtomographies employées dans la littérature (partie 1).

Source	Nombre de modes	f_v^a	Propriétés morphologiques	N_e^b	Dimensions	Composition étudiée
Kaeshammer [27] ^c (2021)	Monomodale	0.56	$\bar{d} \approx 500 \mu\text{m}$	$3^d + 8^e$	3.6 mm × 3.6 mm	RS-RDX
				1	3.6 mm × 3.6 mm × 3.6 mm	
		0.56	$\bar{d} \approx 500 \mu\text{m}$	$3^d + 8^e$	3.6 mm × 3.6 mm	RVI-RDX
				1	3.6 mm × 3.6 mm × 3.6 mm	
		0.56	$\bar{d} \approx 400 \mu\text{m}$	$3^d + 8^e$	3.6 mm × 3.6 mm	VI-RDX
				1	3.6 mm × 3.6 mm × 3.6 mm	
Handley [30] ^c (2011)	Inconnu	0.95	Inconnues	1	0.69 mm × 1.03 mm	PBX 9501
	Inconnu	0.91	Inconnues	1	0.69 mm × 1.03 mm	EDC 37
Barua <i>et al.</i> [97] ^c (2011)	Monomodale	0.42	$\bar{d} = 148 \mu\text{m}$ $\bar{\sigma} = 103.2 \mu\text{m}$	1	3 mm × 3 mm	Explosif factice ^f
		0.64	Inconnues	1		
		0.69	$\bar{d} = 214 \mu\text{m}$ $\bar{\sigma} = 108.9 \mu\text{m}$	1		
		0.77	$\bar{d} = 238 \mu\text{m}$ $\bar{\sigma} = 108.9 \mu\text{m}$	1		
		0.82	Inconnues	1		

a. Fraction volumique. Elle ne tient pas compte de la porosité.

b. Nombre de microstructures générées.

c. Étude portant sur la formation des points chauds.

d. Avant suppression des porosités. porosités

e. Après suppression des porosités

f. Seule la microstructure avec une fraction volumique de 0.69 est issue d'une microtomographie. Les autres microstructures sont obtenues en appliquant une homothétie aux grains.

TABLE B.5 – Microstructures issues de microtomographies employées dans la littérature (partie 3).

Source	Nombre de modes	f_v^a	Propriétés morphologiques	N_e^b	Dimensions	Composition étudiée
Barua <i>et al.</i> ^c [98] (2012)	Monomodale	0.69	$\bar{d} = 214 \mu\text{m}$ $\bar{\sigma} = 108.9 \mu\text{m}$	1	3 mm × 3 mm	Explosif factice ^d
		0.77	$\bar{d} = 238 \mu\text{m}$ $\bar{\sigma} = 121.4 \mu\text{m}$	1		
		0.82	$\bar{d} = 287.4 \mu\text{m}$ $\bar{\sigma} = 120.6 \mu\text{m}$	1		
Barua <i>et al.</i> [99] ^c (2013)	Monomodale	0.82	$\bar{d} = 287.4 \mu\text{m}$	5	3 mm × 3 mm et 15 mm × 3 mm	Explosif factice ^d

a. Fraction volumique. Elle ne tient pas compte de la porosité.

b. Nombre de microstructures générées.

c. Étude portant sur la formation des points chauds.

d. Seule la microstructure avec une fraction volumique de 0.69 est issue d'une microtomographie. Les autres microstructures sont obtenues en appliquant une homothétie aux grains.

Influence de la méthode d'Youngs sur la vitesse du front de déflagration

Considérons le cas unidimensionnel d'une déflagration se propageant dans du HMX pur tel qu'illustré en figure C.1. La vitesse du front de déflagration D_f est considérée constante. Pour modéliser la propagation de la flamme, l'algorithme basé sur la méthode d'Youngs est employé avec une valeur seuil λ_{seuil} . On notera dx la taille des mailles et N le nombre de mailles du domaine. Le temps nécessaire pour que la fraction brûlée d'une maille passe de 0 à 1 est donc dx/D_f .

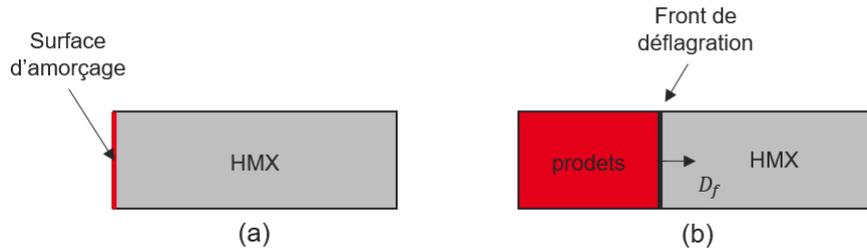


FIGURE C.1 – Schéma de principe pour la configuration étudiée. (a) À l'état initial, le HMX est au repos et les réactions sont amorcées à son extrémité gauche. (b) Le front de déflagration issu de cet amorçage se propage ensuite à vitesse constante D_f .

À l'état initial, le HMX est au repos (figure C.2.a). Dès le premier pas de temps $t = 0$ s, la première maille du domaine commence à réagir et sa fraction brûlée est encore inférieure à λ_{seuil} (figure C.2.b). Au bout d'un temps noté $t_{\text{activation}}$, la fraction brûlée λ de cette maille atteint λ_{seuil} , ce qui active les réactions dans la maille adjacente (figure C.2.c). Ce temps vaut $(dx/D_f)\lambda_{\text{seuil}}$. Comme la vitesse de déflagration est constante, la seconde maille prend également un temps $t_{\text{activation}}$ pour activer la troisième maille (figure C.2.d). Le front de déflagration se propage ainsi jusqu'à activer la dernière maille du domaine à $t = (N - 1)(dx/D_f)\lambda_{\text{seuil}}$ (figure C.2.f). Le temps nécessaire à la dernière maille pour brûler vaut $t_{\text{fin}} = dx/D_f$.

Annexe C. Influence de la méthode d'Youngs sur la vitesse du front de déflagration

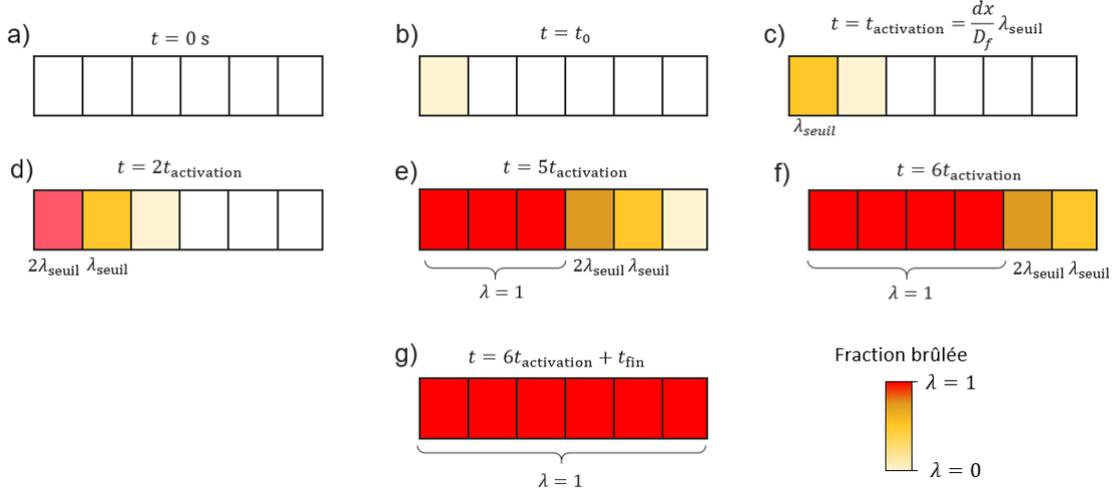


FIGURE C.2 – Schéma illustrant le processus de propagation du front de déflagration dans un cas unidimensionnel pour un nombre de mailles $N = 6$. La fraction brûlée seuil λ_{seuil} est ici choisie telle que $3\lambda_{\text{seuil}} > 1$.

Le temps nécessaire pour que tout le domaine soit consommé par le front de déflagration est donc :

$$t_{\text{comb}} = \underbrace{(N-1) \frac{dx}{D_f} \lambda_{\text{seuil}}}_{\text{Temps de propagation du front de déflagration}} + \underbrace{\frac{dx}{D_f}}_{\text{Temps pour brûler la dernière maille}} \quad (\text{C.1})$$

En introduisant la vitesse de déflagration apparente $D_{f,app} = \frac{D_f}{\lambda_{\text{seuil}}}$, on obtient :

$$t_{\text{comb}} = (N-1) \frac{dx}{D_{f,app}} + \frac{dx}{D_f} \quad (\text{C.2})$$

Si le maillage est suffisamment résolu, $(N-1)(dx/D_{f,app}) \gg dx/D_f$, et le temps de combustion peut être assimilé à :

$$t_{\text{comb}} = (N-1) \frac{dx}{D_{f,app}} \quad (\text{C.3})$$

Dans le cas d'un grain sphérique amorcé à sa surface, la dernière maille à brûler est un cas particulier dans lequel les gradients de fraction brûlée sont infinis (voir figure C.3). La méthode d'Youngs appliquée à la fraction brûlée ne permet plus de reconstruire une interface. Ce cas particulier est pris en compte en brûlant la maille avec la vitesse de réaction :

$$\frac{d\lambda}{dt} = \frac{S}{V_m} D_f \text{ si } \begin{cases} \frac{\partial \lambda}{\partial x} > 0.999 \\ \frac{\partial \lambda}{\partial y} > 0.999 \end{cases} \quad (\text{C.4})$$

Les simulations étant bidimensionnelles avec une grille eulérienne uniforme, V_m correspond à la surface de la maille, et S est pris tel que $S = dx = dy$. Cela revient à reconstruire une surface verticale (ou horizontale) pour le front de déflagration dans la dernière maille.

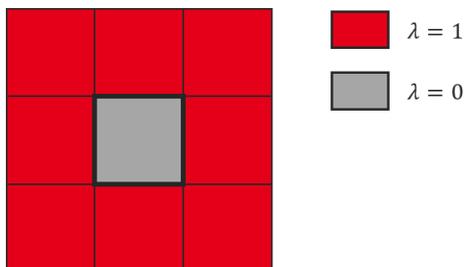


FIGURE C.3 – Cas particulier dans l’algorithme basé sur la méthode d’Youngs pouvant être rencontré lors de la combustion d’un grain sphérique.

Étude de convergence en maillage

Cette annexe présente l'étude de la convergence en maillage réalisée dans le cadre des simulations avec une vitesse de déflagration dépendante de la pression (voir chapitre 11). La microstructure employée possède un diamètre équivalent moyen de $162\ \mu\text{m}$.

La figure D.1.a présente les résultats des simulations réalisées avec une vitesse d'impact de $800\ \text{m s}^{-1}$ et trois tailles de mailles : $25\ \mu\text{m}$, $15\ \mu\text{m}$ et $10\ \mu\text{m}$. On peut ainsi constater que la taille de maille influence fortement les évolutions de vitesse de choc : le maillage n'est pas encore convergé. Un calcul a également été réalisé avec un maillage à $5\ \mu\text{m}$. Cependant, celui-ci s'est arrêté prématurément et n'a pas pu être exploité.

Des simulations ont été réalisées avec la même microstructure mais pour une vitesse d'impact plus élevée, de $1000\ \text{m s}^{-1}$. Des tailles de mailles de $10\ \mu\text{m}$ et $5\ \mu\text{m}$ ont alors été étudiées. La figure D.1.b illustre les évolutions de vitesse de choc obtenues pour ces simulations. Pour le maillage à $5\ \mu\text{m}$, le calcul s'est arrêté prématurément et seul le début de l'évolution de la vitesse de choc peut être observé. Néanmoins, bien que des différences soient toujours présentes entre les profils obtenus, elles sont plus faibles que ceux obtenus en figure D.1.a et une convergence du maillage semble se profiler.

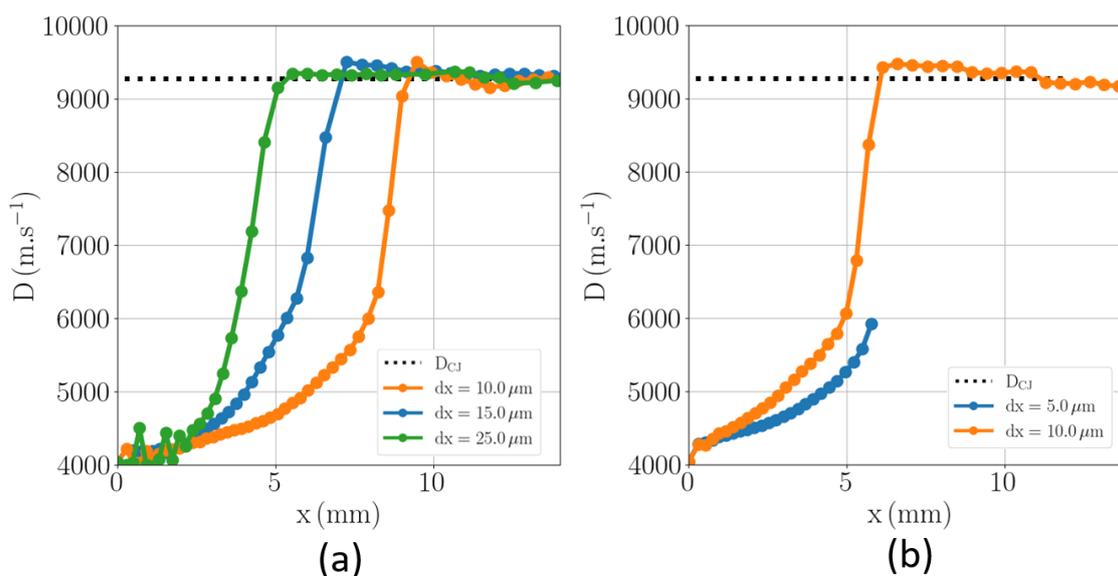


FIGURE D.1 – Influence du maillage sur l'évolution spatiale de la vitesse de choc pour une vitesse d'impact de $800\ \text{m s}^{-1}$ (a) et de $1000\ \text{m s}^{-1}$ (b). La microstructure employée possède un diamètre équivalent moyen de $162\ \mu\text{m}$.

Bibliographie

1. CHUZEVILLE, V. P. *Amorçage en détonation des explosifs hétérogènes de type coulé fondu : Établissement de corrélations entre microstructure et réactivité* Thèses (Universite Paris Saclay (COmUE), oct. 2016) (cf. pages [i](#), [18](#), [36](#), [40](#), [43](#), [51](#), [54](#), [62](#), [63](#), [64](#), [66](#), [69](#), [98](#), [120](#)).
2. ELIA, T. *Étude théorique et expérimentale de l'amorçage par choc et de la détonation de compositions énergétiques intégrant des additifs oxydants et métalliques réactifs*. Thèses (Institut Polytechnique de Paris, sept. 2019) (cf. pages [i](#), [36](#), [43](#), [54](#), [59](#), [63](#), [64](#), [98](#)).
3. KOVACS, M. *Australian mines find explosive power in IT* <https://www.itnews.com.au/news/australian-mines-find-explosive-power-in-it-336174> (cf. page [1](#)).
4. STANKOVIĆ, S., ŽBULJ, M. & ŠKRLEC, V. Detonography : Making of renaissance mine. *Rudarsko-geološko-naftni zbornik* **33**, 1–6 (2017) (cf. page [1](#)).
5. SLADE, L. M. & KALANGAHE, B. Dynamite fishing in Tanzania. *Marine Pollution Bulletin* **101**, 491-496 (2015) (cf. page [1](#)).
6. DURGUTLU, A., GÜLENC, B. & FINDIK, F. Examination of copper/stainless steel joints formed by explosive welding. *Materials & Design* **26**, 497-507 (2005) (cf. page [1](#)).
7. BAUDIN, G. *Physique des explosifs : de l'amorçage aux effets des explosifs condensés* Habilitation a diriger des recherches (Universite Paris Ouest Nanterre La Defense, nov. 2013) (cf. pages [2](#), [8](#), [19](#), [20](#), [64](#)).
8. BOWDEN, F. P., MULCAHY, M. F. R., VINES, R. G., YOFFE, A., RIVETT, A. C. D. & ROBERTSON, R. The detonation of liquid explosives by gentle impact. The effect of minute gas spaces. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences* **188**, 291-311 (1947) (cf. page [2](#)).
9. JOHNSON, B. P., ZHOU, X., IHARA, H. & DLOTT, D. D. Observing Hot Spot Formation in Individual Explosive Crystals Under Shock Compression. *The Journal of Physical Chemistry A* **124**. PMID : 32432865, 4646-4653 (2020) (cf. pages [2](#), [3](#), [23](#), [24](#), [25](#), [26](#), [27](#), [29](#), [32](#), [102](#), [195](#), [196](#)).
10. JOHNSON, B. P., ZHOU, X. & DLOTT, D. D. Shock Pressure Dependence of Hot Spots in a Model Plastic-Bonded Explosive. *The Journal of Physical Chemistry A* **126**. PMID : 34982934, 145-154 (2022) (cf. pages [2](#), [3](#), [23](#), [24](#), [25](#), [26](#), [27](#), [102](#), [121](#), [187](#), [188](#), [195](#), [196](#)).
11. HANDLEY, C. A., LAMBOURN, B. D., WHITWORTH, N. J., JAMES, H. R. & BELFIELD, W. J. Understanding the shock and detonation response of high explosives at the continuum and meso scales. *Applied Physics Reviews* **5**, 011303 (mars 2018) (cf. pages [2](#), [19](#), [20](#), [23](#), [70](#), [71](#), [102](#), [120](#)).
12. OSMONT, A. Poudres, explosifs et artifices. *Fondamentaux en chimie* (nov. 2021) (cf. pages [7](#), [9](#), [10](#)).
13. LEE, J. H. *The detonation phenomenon* (Cambridge University Press, 2008) (cf. pages [7](#), [8](#), [10](#)).

14. THEVENIN, M. *Détonique théorique, tome 1* (École nationale supérieure de techniques avancées, département chimie, 1981) (cf. pages 8, 9, 10).
15. KUBOTA, S. *Detonation Phenomena of Condensed Explosives* (Springer, 2023) (cf. pages 8, 10, 11, 12).
16. BOGGS, T., PRICE, C., ZURN, D., DERR, R. & DIBBLE, E. *The self deflagration of cyclotetramethylenetetranitramine HMX 13th Propulsion Conference* () (cf. pages 8, 120, 121, 167, 168, 169, 170, 187, 188, 189, 194).
17. ESPOSITO, A. P., FARBER, D. L., REAUGH, J. E. & ZAUG, J. M. Reaction Propagation Rates in HMX at High Pressure. *Propellants, Explosives, Pyrotechnics* **28**, 83-88 (2003) (cf. pages 8, 68, 121, 168, 169, 170, 187).
18. QUINCHON, J. Les poudres, propergols et explosifs (Tome 1) : Les explosifs. *Paris : Technique et Documentation (Lavoisier)*, 115-27 (1986) (cf. page 10).
19. CHAPMAN, D. L. VI. On the rate of explosion in gases. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science* **47**, 90-104 (1899) (cf. page 13).
20. JOUGUET, E *et al.* Sur l'onde explosive. *CR Acad. Sci. Paris* **140**, 1211 (1904) (cf. page 13).
21. ZELDOVICH, J. Sur la théorie de la propagation de la détonation dans les systèmes gazeux. *Zhurnal Experimentanoi i Teoritiskeskoï Fiziki* **10**, 542-565 (1940) (cf. page 14).
22. Von NEUMANN, J. Theory of detonation waves. *John von Neumann, collected works* **6**, 203-218 (1942) (cf. page 14).
23. DÖRING, W. Über den Detonationsvorgang in Gasen. *Annalen der Physik* **435**, 421-436 (1943) (cf. page 14).
24. DATTELBAUM, D. M., SHEFFIELD, S. A., STAHL, D. B., DATTELBAUM, A. M. & ENGELKE, R. Influence of hot spot features on the initiation characteristics of heterogeneous nitromethane (jan. 2010) (cf. pages 17, 18).
25. HUBBARD, H. W. & JOHNSON, M. H. Initiation of Detonations. *Journal of Applied Physics* **30**, 765-769 (mai 1959) (cf. pages 18, 64).
26. LIU, C. On the minimum size of representative volume element (RVE). (Jan. 2004) (cf. pages 18, 19).
27. KAESHAMMER, E. *Étude expérimentale et numérique de la sensibilité de compositions énergétiques : influence de la microstructure et rôle de l'endommagement* Thèses (Université Paris sciences et lettres, 2021) (cf. pages 19, 22, 71, 78, 84, 85, 86, 90, 98, 124, 153, 198, IX).
28. BOWDEN, F. P. & YOFFE, A. D. *Initiation and growth of explosion in liquids and solids* (CUP Archive, 1985) (cf. page 19).
29. HORIE, Y. *Hot Spots, High Explosives Ignition, and Material Microstructure Explosion, Shock Wave and High-Energy Reaction Phenomena II* **767** (Trans Tech Publications Ltd, jan. 2014), 3-12 (cf. pages 19, 23).

30. HANDLEY, C. A. *Numerical modelling of two HMX-based plastic-bonded explosives at the mesoscale* thèse de doctorat (University of St Andrews, 2011) (cf. pages 19, 71, 83, 84, 85, 90, 98, 198, IX).
31. MENIKOFF, R. Hot spot formation from shock reflections. *Shock Waves* **21**, 141-148 (2011) (cf. pages 19, 21).
32. FIELD, J. E. Hot spot ignition mechanisms for explosives. *Accounts of chemical Research* **25**, 489-496 (1992) (cf. pages 19, 22).
33. BORNE, L., MORY, J. & SCHLESSER, F. Reduced Sensitivity RDX (RS-RDX) in Pressed Formulations : Respective Effects of Intra-Granular Pores, Extra-Granular Pores and Pore Sizes. *Propellants, Explosives, Pyrotechnics* **33**, 37-43 (2008) (cf. pages 20, 90, 99).
34. RAI, N. K., SCHMIDT, M. J. & UDAYKUMAR, H. S. High-resolution simulations of cylindrical void collapse in energetic materials : Effect of primary and secondary collapse on initiation thresholds. *Phys. Rev. Fluids* **2**, 043202 (4 2017) (cf. page 20).
35. DAS, P., ZHAO, P., PERERA, D., SEWELL, T. & UDAYKUMAR, H. S. Molecular dynamics-guided material model for the simulation of shock-induced pore collapse in β -octahydro-1,3,5,7-tetranitro-1,3,5,7-tetrazocine (β -HMX). *Journal of Applied Physics* **130**, 085901 (août 2021) (cf. page 20).
36. LI, C., HAMILTON, B. W. & STRACHAN, A. Hotspot formation due to shock-induced pore collapse in 1,3,5,7-tetranitro-1,3,5,7-tetraoctane (HMX) : Role of pore shape and shock strength in collapse mechanism and temperature. *Journal of Applied Physics* **127**, 175902 (mai 2020) (cf. pages 20, 95).
37. BEN-DOR, G. *Shock wave reflection phenomena* (Springer, 2007) (cf. page 21).
38. BELON, S., ERZAR, B., KAESHAMMER, E. & BORNE, L. *Influence of the shape of RDX grains on the creation of hot spots by mesoscale modeling* 2020 (cf. page 21).
39. CHAUDHRI, M. Shock initiation of fast decomposition in crystalline solids. *Combustion and Flame* **19**, 419-425 (1972) (cf. page 22).
40. DIENES, J., ZUO, Q. & KERSHNER, J. Impact initiation of explosives and propellants via statistical crack mechanics. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* **54**, 1237-1275 (2006) (cf. pages 22, 69).
41. PANCHADHARA, R & GONTHIER, K. Mesoscale analysis of volumetric and surface dissipation in granular explosive induced by uniaxial deformation waves. *Shock Waves* **21**, 43-61 (2011) (cf. pages 22, 23).
42. DROUET, D., PICART, D., BAILLY, P. & BRUNETON, E. Plastic Dissipation and Hot-Spot Formation in HMX-Based PBXs Subjected to Low Velocity Impact. *Propellants, Explosives, Pyrotechnics* **45**, 1884-1893 (2020) (cf. page 22).
43. MASSONI, J., SAUREL, R., BAUDIN, G. & DEMOL, G. A mechanistic model for shock initiation of solid explosives. *Physics of Fluids* **11**, 710-736 (mars 1999) (cf. pages 22, 69).

44. AUSTIN, R. A., BARTON, N. R., REAUGH, J. E. & FRIED, L. E. Direct numerical simulation of shear localization and decomposition reactions in shock-loaded HMX crystal. *Journal of Applied Physics* **117**, 185902 (mai 2015) (cf. page 22).
45. AUSTIN, R. A., BARTON, N. R., HOWARD, W. M. & FRIED, L. E. Modeling pore collapse and chemical reactions in shock-loaded HMX crystals. *Journal of Physics : Conference Series* **500**, 052002 (2014) (cf. page 22).
46. NELMS, M. D., KROONBLAWD, M. P. & AUSTIN, R. A. Pore collapse in single-crystal TATB under shock compression. *AIP Conference Proceedings* **2272**, 050001 (nov. 2020) (cf. page 22).
47. BASSETT, W. P., JOHNSON, B. P. & DLOTT, D. D. Hot Spot Chemistry in Several Polymer-Bound Explosives under Nanosecond Shock Conditions. *Propellants, Explosives, Pyrotechnics* **45**, 338-346 (2020) (cf. pages 23, 25, 27, 28, 29).
48. BASSETT, W. P. & DLOTT, D. D. Shock initiation of explosives : Temperature spikes and growth spurts. *Applied Physics Letters* **109**, 091903 (août 2016) (cf. page 24).
49. BASSETT, W. P., JOHNSON, B. P. & DLOTT, D. D. Dynamic absorption in optical pyrometry of hot spots in plastic-bonded triaminotrinitrobenzene. *Applied Physics Letters* **114**, 194101 (mai 2019) (cf. page 24).
50. AKHTAR, M., SALVATI, L., VALLURI, S. K. & DLOTT, D. D. Shock ignition and deflagration growth in plastic-bonded TATB (1, 3, 5-trinitro-2, 4, 6-triaminobenzene) microstructures. *Applied Physics Letters* **121**, 064101 (août 2022) (cf. pages 28, 29, 30).
51. SELLAN, D., ZHOU, X., SALVATI, L., VALLURI, S. K. & DLOTT, D. D. Seeing inside shocked plastic-bonded explosives. *AIP Conference Proceedings* **2844**, 260002 (sept. 2023) (cf. pages 30, 31, 32).
52. VANDERSALL, K. S., TARVER, C. M., GARCIA, F. & URTIEW, P. A. Shock Initiation Experiments on PBX9501 Explosive at 150°C for Ignition and Growth Modeling. *AIP Conference Proceedings* **845**, 1127-1130 (juill. 2006) (cf. pages 34, 36).
53. FOREST, C. A. *Burning and detonation Proc. 7th Symposium (International) on Detonation* (1978), 234-243 (cf. page 34).
54. RAMSAY, J. & POPOLATO, A. *Analysis of shock wave and initiation data for solid explosives Proceedings of the Fourth Symposium (International) on Detonation* (1965), 233-238 (cf. page 35).
55. GUSTAVSEN, R. & SHEFFIELD, S. *Shock initiation of new and aged PBX 9501 measured with embedded electromagnetic particle velocity gauges* rapport technique (Los Alamos National Lab.(LANL), Los Alamos, NM (United States), 2000) (cf. pages 36, 37, 38, 55, 56, 57, 58, 59, 62).
56. VANDERSALL, K. S., TARVER, C. M., GARCIA, F., URTIEW, P. A. & CHIDESTER, S. K. Shock Initiation Experiments on the HMX-Based Explosive LX-10 with Associated Ignition and Growth Modeling. *AIP Conference Proceedings* **955**, 1010-1013 (déc. 2007) (cf. page 36).

57. URTIEW, P., VANDERSALL, K., TARVER, C., GARCIA, F & FORBES, J. Shock initiation of composition B and C-4 explosives : Experiments and modeling. *Russian Journal of Physical Chemistry B* **2**, 162-171 (2008) (cf. page 36).
58. VANDERSALL, K. S., GARCIA, F. & TARVER, C. M. Shock Initiation Experiments on the TATB Based Explosive RX-03-GO with Ignition and Growth Modeling. *AIP Conference Proceedings* **1195**, 412-415 (déc. 2009) (cf. page 36).
59. GARCIA, F., VANDERSALL, K. S. & TARVER, C. M. Shock initiation experiments with ignition and growth modeling on low density HMX. *Journal of Physics : Conference Series* **500**, 052048 (2014) (cf. page 36).
60. GARCIA, F., VANDERSALL, K. S., TARVER, C. M. & URTIEW, P. A. Shock Initiation Experiments on the LLM-105 Explosive RX-55-AA at 25°C and 150°C with Ignition and Growth Modeling. *AIP Conference Proceedings* **955**, 907-910 (déc. 2007) (cf. page 36).
61. CHIDESTER, S. K., THOMPSON, D. G., VANDERSALL, K. S., IDAR, D. J., TARVER, C. M., GARCIA, F. & URTIEW, P. A. Shock Initiation Experiments on PBX 9501 Explosive at Pressures Below 3 GPa with Associated Ignition and Growth Modeling. *AIP Conference Proceedings* **955**, 903-906 (déc. 2007) (cf. page 36).
62. LEE, R. J., DORGAN, R. J., SVINGALA, F. R., DATTELBAUM, D. M., FURNISH, M. D. & SUTHERLAND, G. T. Techniques for collection and analysis of pop-plot data for use in parameterization of reactive flow models. *AIP Conference Proceedings* **1979**, 100026 (juill. 2018) (cf. page 36).
63. LACINA, D., WILDE, B. & NEEL, C. Unreacted Shock and Detonation Response of EXP-A Measured with Embedded Electromagnetic Gauges (2020) (cf. page 36).
64. HILL, L. & GUSTAVSEN, R. *On the characterization and mechanisms of shock initiation in heterogeneous explosives Twelfth International Detonation Symposium* (2002), 975 (cf. pages 36, 37, 43, 45, 51, 54, 55, 60).
65. SOLLIER, A., MANCZUR, P., CROUZET, B., SOULARD, L., QUESADA, J.-H., CHEVALIER, J.-M., BOUINOT, P., DUCONGET, R. & MATIGNON, C. *Single and double shock initiation of TATB based explosive T2 : Comparison of electromagnetic gauge measurements with DNS using different reactive flow models Proceedings of the 14th Symposium (International) on Detonation. Coeur d'Alene, USA* (2010), 563-572 (cf. page 38).
66. SOLLIER, A, MANCZUR, P, CROUZET, B, SOULARD, L, QUESADA, J., CHEVALIER, J., BOUINOT, P, DUCONGET, R, BOUYER, V, HEDIN, A *et al.* Experimental characterization of the shock to detonation transition and the sustained detonation in a TATB-based explosive using the embedded multiple electromagnetic particle velocity gauge method (cf. page 38).
67. SOLLIER, A., HÉBERT, P., LETREMY, R., MINEAU, V., BOISSY, X., PIONNEAU, E., DOUCET, M. & BOUTON, E. Experimental characterization of the shock to detonation transition in the TX1 HMX-TATB based explosive using embedded electromagnetic particle velocity gauges. *AIP Conference Proceedings* **2272**, 030028 (nov. 2020) (cf. page 38).

68. PRICE, M. A., LEIDING, J. A., ASLAM, T. D., COE, J. D., RAMOS, K. J., BOLME, C. A., FRANCOIS, E. G., LICHTHARDT, J. P., BOWDEN, P. P., THOMPSON, D. G. & TICKNOR, C. A reactive flow model for the 3,3'-diamino-4,4'-azoxyfurazan based plastic bonded explosive (PBX 9701). *Journal of Applied Physics* **130**, 215903 (déc. 2021) (cf. page 38).
69. CHUZEVILLE, V., BAUDIN, G., LEFRANÇOIS, A., GENETIER, M., BARBARIN, Y., JACQUET, L., LHOPITAUT, J.-L., PEIX, J., BOULANGER, R. & CATOIRE, L. Detonation initiation of heterogeneous melt-cast high explosives. *AIP Conference Proceedings* **1793**, 030009 (jan. 2017) (cf. pages 38, 40, 50).
70. BURNS, M. J. & CHIQUETE, C. Shock initiation of the HMX-based explosive PBX 9012 : Experiments, uncertainty analysis, and unreacted equation-of-state. *Journal of Applied Physics* **127**, 215107 (juin 2020) (cf. pages 38, 39).
71. MI, X., MICHAEL, L., NIKIFORAKIS, N. & HIGGINS, A. J. Effect of spatial distribution of mesoscale heterogeneities on the shock-to-detonation transition in liquid nitromethane. *Combustion and Flame* **222**, 392-410 (2020) (cf. page 39).
72. BORDZILOVSKII, S. A. & KARAKHANOV, S. M. Desensitization of pressed RDX/paraffin and HMX/paraffin compounds by multiple shock waves. *Combustion, Explosion and Shock Waves* **31**, 227-235 (1995) (cf. page 39).
73. PERRY, W. L., DUQUE, A. L., MANG, J. T. & CULP, D. B. Computing continuum-level explosive shock and detonation response over a wide pressure range from microstructural details. *Combustion and Flame* **231**, 111470 (2021) (cf. page 39).
74. BURNS, M. J., GUSTAVSEN, R. L. & BARTRAM, B. D. One-dimensional plate impact experiments on the cyclotetramethylene tetranitramine (HMX) based explosive EDC32. *Journal of Applied Physics* **112**, 064910 (sept. 2012) (cf. page 39).
75. JONES, J. D., MA, X., CLEMENTS, B. E., GIBSON, L. L. & GUSTAVSEN, R. L. Measurement and reactive burn modeling of the shock to detonation transition for the HMX based explosive LX-14. *AIP Conference Proceedings* **1979**, 100022 (juill. 2018) (cf. pages 40, 50).
76. VICTOR, A. C. A Simple Method for Calculating Sympathetic Detonation of cylindrical, cased explosive charges. *Propellants, Explosives, Pyrotechnics* **21**, 90-99 (1996) (cf. pages 40, 50).
77. VANDERSALL, K. S., TARVER, C. M., GARCIA, F. & CHIDESTER, S. K. On the low pressure shock initiation of octahydro-1,3,5,7-tetranitro-1,3,5,7-tetrazocine based plastic bonded explosives. *Journal of Applied Physics* **107**, 094906 (mai 2010) (cf. page 43).
78. LINDSTROM, I. E. Plane Shock Initiation of an RDX Plastic-Bonded Explosive. *Journal of Applied Physics* **37**, 4873-4880 (déc. 1966) (cf. pages 43, 44, 54, 59).
79. DICK, J. Buildup to detonation in solid high explosives during plane shock initiation : Some comparisons. *Symposium (International) on Combustion* **18**. Eighteenth Symposium (International) on Combustion, 1623-1629 (1981) (cf. pages 46, 54, 62).
80. PERRY, W. L., BURNS, M. & ASLAM, T. Connecting details of heterogeneous explosive reactive wave profiles to the hydrodynamic reaction rate. *AIP Conference Proceedings* **2844**, 290009 (sept. 2023) (cf. pages 54, 62).

81. ELIA, T., CHUZEVILLE, V., BAUDIN, G., GENETIER, M., LEFRANÇOIS, A., OSMONT, A. & BOULANGER, R. Review of the Wedge Test and Single Curve Initiation Principle Applied to Aluminized High Explosives. *Propellants, Explosives, Pyrotechnics* **45**, 1541-1553 (2020) (cf. pages 54, 55, 62).
82. BERNIER, H. *Contribution à l'étude de la génération de la détonation provoquée par impact sur un explosif* (Louis-Jean, 1964) (cf. pages 64, 65).
83. MADER, C. L. & FOREST, C. A. Two-dimensional homogeneous and heterogeneous detonation wave propagation (fév. 1976) (cf. page 65).
84. JOHNSON, J. N., TANG, P. K. & FOREST, C. A. Shock-wave initiation of heterogeneous reactive solids. *Journal of Applied Physics* **57**, 4323-4334 (mai 1985) (cf. page 65).
85. LEE, E. L. & TARVER, C. M. Phenomenological model of shock initiation in heterogeneous explosives. *The Physics of Fluids* **23**, 2362-2372 (déc. 1980) (cf. page 67).
86. TARVER, C., ERICKSON, L. & PARKER, N. *Shock Waves in Condensed Matter 1983* (éditeurs ASAY, J., GRAHAM, R. & STRAUB, G.) 609-612 (Elsevier, Amsterdam, 1984) (cf. page 67).
87. MENIKOFF, R. & SHAW, M.S. Reactive burn models and ignition & growth concept. *EPJ Web of Conferences* **10**, 00003 (2010) (cf. pages 67, 200).
88. HILL, L. G., ZIMMERMANN, B. & NICHOLS Albert L., I. ON THE BURN TOPOLOGY OF HOT-SPOT-INITIATED REACTIONS. *AIP Conference Proceedings* **1195**, 432-435 (déc. 2009) (cf. page 68).
89. NICHOLS, A. & TARVER, C. A statistical hot spot reactive flow model for shock initiation and detonation of solid HE. *Symposium (International) on Detonation* **12**, 489-496 (2002) (cf. page 68).
90. MENIKOFF, R. & SHAW, M. S. The SURF model and the curvature effect for PBX 9502. *Combustion Theory and Modelling* **16**, 1140-1169 (2012) (cf. page 69).
91. BELMAS, R, PLOTARD, J. & BIANCHI, C. *A physical model of shock to detonation transition in heterogeneous explosives Proc., Symp. Detonation, 10th* (1993), 12-16 (cf. page 69).
92. SESHADRI, P. K., NGUYEN, Y. T., SEN, O. & UDAYKUMAR, H. S. Meso-scale simulation of energetic materials. II. Establishing structure-property linkages using synthetic microstructures. *Journal of Applied Physics* **131**, 055905 (fév. 2022) (cf. page 71).
93. WANG, X., WU, Y. & HUANG, F. Thermal-mechanical-chemical responses of polymer-bonded explosives using a mesoscopic reactive model under impact loading. *Journal of Hazardous Materials* **321**, 256-267 (2017) (cf. pages 71, 78, 87, 99, VIII).
94. BAER, M. Modeling heterogeneous energetic materials at the mesoscale. *Thermochemica Acta* **384**. ENERGETIC MATERIALS, 351-367 (2002) (cf. pages 71, 72, 73, VI).
95. MILLER, C. M. & SPRINGER, H. K. Probabilistic effects of porosity and chemical kinetics on the shock initiation of an octahydro-1,3,5,7-tetranitro-1,3,5,7-tetrazocine (HMX) based explosive. *Journal of Applied Physics* **129**, 215104 (juin 2021) (cf. pages 71, 96, 97, 99, VIII).

96. HARDIN, D. B., RIMOLI, J. J. & ZHOU, M. Analysis of thermomechanical response of polycrystalline HMX under impact loading through mesoscale simulations. *AIP Advances* **4**, 097136 (sept. 2014) (cf. page 71).
97. BARUA, A. & ZHOU, M. A Lagrangian framework for analyzing microstructural level response of polymer-bonded explosives. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering* **19**, 055001 (2011) (cf. pages 71, 73, 74, 76, 78, VI, IX).
98. BARUA, A., HORIE, Y. & ZHOU, M. Energy localization in HMX-Estane polymer-bonded explosives during impact loading. *Journal of Applied Physics* **111**, 054902 (mars 2012) (cf. pages 71, 76, 77, 98, I, II, VI, X).
99. BARUA, A., KIM, S., HORIE, Y. & ZHOU, M. Ignition criterion for heterogeneous energetic materials based on hotspot size-temperature threshold. *Journal of Applied Physics* **113**, 064906 (fév. 2013) (cf. pages 71, 73, 75, 76, 78, 79, 87, I, II, III, VI, X).
100. BARUA, A., KIM, S., HORIE, Y. & ZHOU, M. Prediction of probabilistic ignition behavior of polymer-bonded explosives from microstructural stochasticity. *Journal of Applied Physics* **113**, 184907 (mai 2013) (cf. pages 71, 75, II).
101. KIM, S., BARUA, A., HORIE, Y. & ZHOU, M. Ignition probability of polymer-bonded explosives accounting for multiple sources of material stochasticity. *Journal of Applied Physics* **115**, 174902 (mai 2014) (cf. pages 71, 73, 75, 78, 79, 98, III, VII).
102. KIM, S., MILLER, C., HORIE, Y., MOLEK, C., WELLE, E. & ZHOU, M. Computational prediction of probabilistic ignition threshold of pressed granular Octahydro-1,3,5,7-tetranitro-1,3,5,7-tetrazocine (HMX) under shock loading. *Journal of Applied Physics* **120**, 115902 (sept. 2016) (cf. pages 71, 73, 75, 80, 85, VII).
103. KIM, S., WEI, Y., HORIE, Y. & ZHOU, M. Prediction of shock initiation thresholds and ignition probability of polymer-bonded explosives using mesoscale simulations. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* **114**, 97-116 (2018) (cf. pages 71, 73, 75, 76, 80, 81, 85, 98, III, VII).
104. WEI, Y., HORIE, Y., MOLEK, C., WELLE, E. & ZHOU, M. A computational study of the effect of grain size distribution on shock initiation of pressed HMX powder. *Sci Tech Energetic Mater* **79**, 142-145 (2018) (cf. pages 71, 73, 74).
105. WEI, Y., KIM, S., HORIE, Y. & ZHOU, M. Quantification of probabilistic ignition thresholds of polymer-bonded explosives with microstructure defects. *Journal of Applied Physics* **124**, 165110 (oct. 2018) (cf. pages 71, 73, 75, 81, 82, III, VII).
106. WEI, Y., MILLER, C., OLSEN, D. & ZHOU, M. Prediction of Probabilistic Shock Initiation Thresholds of Energetic Materials Through Evolution of Thermal-Mechanical Dissipation and Reactive Heating. *Journal of Applied Mechanics* **88**, 091005 (mai 2021) (cf. pages 71, 74, 75, 79, 82, 83, 85, 87, 153, VII).
107. WEI, Y., RANJAN, R., ROY, U., SHIN, J. H., MENON, S. & ZHOU, M. Integrated Lagrangian and Eulerian 3D microstructure-explicit simulations for predicting macroscopic probabilistic SDT thresholds of energetic materials. *Computational Mechanics* **64**, 547-561 (2019) (cf. pages 71, 74, 75, 88, 89, 98, VII).

108. MILLER, C., KITTELL, D., YARRINGTON, C. & ZHOU, M. Prediction of Probabilistic Detonation Threshold via Millimeter-Scale Microstructure-Explicit and Void-Explicit Simulations. *Propellants, Explosives, Pyrotechnics* **45**, 254-269 (2020) (cf. pages 71, 89, 90, 93, 95, 99, VII).
109. MILLER, C., OLSEN, D., WEI, Y. & ZHOU, M. Three-dimensional microstructure-explicit and void-explicit mesoscale simulations of detonation of HMX at millimeter sample size scale. *Journal of Applied Physics* **127**, 125105 (mars 2020) (cf. pages 71, 90, 93, 95, 99, VII).
110. MILLER, C., KIM, S., HORIE, Y. & ZHOU, M. Ignition thresholds of aluminized HMX-based polymer-bonded explosives. *AIP Advances* **9**, 045103 (avr. 2019) (cf. pages 71, 75, III).
111. BAER, M. R., GRAHAM, R. A., ANDERSON, M. U., SHEFFIELD, S. A. & GUSTAVSEN, R. L. Experimental and theoretical investigations of shock-induced flow of reactive porous media (nov. 1996) (cf. pages 72, 73).
112. BAER, M. R. Shock wave structure in heterogeneous reactive media (juin 1997) (cf. pages 72, 73).
113. BAER, M. R., KIPP, M. E. & SWOL, F. v. Micromechanical modeling of heterogeneous energetic materials (sept. 1998) (cf. pages 72, 73).
114. BAER, M. R. Computational modeling of heterogeneous reactive materials at the mesoscale. *AIP Conference Proceedings* **505**, 27-34 (avr. 2000) (cf. pages 72, 73).
115. KERLEY, G. I. CTH equation of state package : porosity and reactive burn models. *Sandia National Laboratories report SAND92-0553* (1992) (cf. page 72).
116. ZHOU, M., KIM, S., WEI, Y. & Woodruff School of MECHANICAL ENGINEERING, G. I. o. T. A. U. S. 2D and 3D Multiscale/Multicomponent Modeling of Impact Response of Heterogeneous Energetic Composites (2016) (cf. pages 73, 75, 76).
117. SIVIOUR, C., LAITY, P., PROUD, W., FIELD, J., PORTER, D, CHURCH, P., GOULD, P & HUNTINGDON-THRESHER, W. High strain rate properties of a polymer-bonded sugar : their dependence on applied and internal constraints. *Proceedings of the Royal Society A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences* **464**, 1229-1255 (2008) (cf. pages 76, 77).
118. JAMES, H. R. An Extension to the Critical Energy Criterion used to predict shock initiation thresholds. *Propellants, Explosives, Pyrotechnics* **21**, 8-13 (1996) (cf. page 80).
119. WELLE, E. J., MOLEK, C. D., WIXOM, R. R. & SAMUELS, P. Microstructural effects on the ignition behavior of HMX. *Journal of Physics : Conference Series* **500**, 052049 (2014) (cf. page 80).
120. COFFELT, C., OLSEN, D., MILLER, C. & ZHOU, M. Effect of void positioning on the detonation sensitivity of a heterogeneous energetic material. *Journal of Applied Physics* **131**, 065101 (fév. 2022) (cf. pages 90, 91, 92, 96, 99, VIII).
121. KERLEY, G. I. Hydrocode Calculations of Detonator/Booster Initiation by Fragment Impacts (1997) (cf. pages 91, 92).

122. OLSEN, D. & ZHOU, M. Shock-to-detonation transition behavior of functionally graded energetic materials. *Journal of Applied Physics* **134**, 115901 (sept. 2023) (cf. pages 91, 92, 93, 99, 200, VIII).
123. CHOI, S., KIM, B., HAN, S. & YOH, J. J. Multiscale modeling of transients in the shock-induced detonation of heterogeneous energetic solid fuels. *Combustion and Flame* **221**, 401-415 (2020) (cf. pages 94, 95, 99, VIII).
124. STANY, G. *Pore-scale simulations of pop-plot in HMX and HMX-based explosives* (2023), 27-35 (cf. pages 95, 96, 99, VIII).
125. JACKSON, T. L., ZHANG, J. & SHORT, M. Multiscale Approach to Shock to Detonation Transition in Energetic Materials. *Propellants, Explosives, Pyrotechnics* **45**, 316-329 (2020) (cf. pages 97, 101).
126. PERRIOT, R., CAWKWELL, M. J., MARTINEZ, E. & MCGRANE, S. D. Reaction Rates in Nitromethane under High Pressure from Density Functional Tight Binding Molecular Dynamics Simulations. *The Journal of Physical Chemistry A* **124**. PMID : 32227951, 3314-3328 (2020) (cf. page 101).
127. SEWELL, T. D., GAN, C. K., JARAMILLO, E & STRACHAN, A. H. High-explosive properties from classical molecular dynamics simulations and quantum-chemical computations (jan. 2004) (cf. page 101).
128. GIBBS, T. R. & POPOLATO, A. *LASL explosive property data* (Univ of California Press, 2023) (cf. pages 103, 163, 183).
129. BURNSIDE, N. J., SON, S. F., ASAY, B. W. & SKIDMORE, C. B. Particle characterization of pressed granular HMX. *AIP Conference Proceedings* **429**, 571-574 (juill. 1998) (cf. pages 103, 115, 116, 153).
130. JOURDREN, H, SIBEAUD, J. & ADAMCZEWSKI-CAURET, M. Logiciel Ouranos : présentation générale et utilisation en détonique. *Revue Scientifique et Technique de Défense* **4**, 51-58 (1995) (cf. pages 107, 196).
131. QUEY, R., DAWSON, P. & BARBE, F. Large-scale 3D random polycrystals for the finite element method : Generation, meshing and remeshing. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* **200**, 1729-1745 (2011) (cf. pages 108, 109, 112, 196).
132. QUEY, R., VILLANI, A. & MAURICE, C. Nearly uniform sampling of crystal orientations. *Journal of Applied Crystallography* **51**, 1162-1173 (2018) (cf. page 109).
133. GEUZAIN, C. & REMACLE, J.-F. Gmsh : A 3-D finite element mesh generator with built-in pre- and post-processing facilities. *International Journal for Numerical Methods in Engineering* **79**, 1309-1331 (2009) (cf. pages 109, 114, 196).
134. LORENSEN, W. E. & CLINE, H. E. *Seminal graphics : pioneering efforts that shaped the field* 347-353 (1998) (cf. page 110).
135. BOUCHET, T. *Transition Combustion-Déflagration-Détonation d'un explosif secondaire poreux confiné. Influence de la microstructure* Thèses (ISAE-ENSMA Ecole Nationale Supérieure de Mécanique et d'Aérotechnique - Poitiers, oct. 2021) (cf. pages 115, 116).

136. COCHRAN, S. G. & CHAN, J. Shock initiation and detonation models in one and two dimensions. [PBX-9404, RX-03-BB] (jan. 1979) (cf. page 118).
137. LEE, E. L., HORNIG, H. C. & KURY, J. W. Adiabatic Expansion Of High Explosive Detonation Products (mai 1968) (cf. page 118).
138. GENETIER, M. & BAUDIN, G. *SIAME - A New Thermochemical Code* (2019), 394-399 (cf. page 119).
139. ZAUG, J. M., YOUNG, C. E., LONG, G. T., MAIENSCHIN, J. L., GLASCOE, E. A., HANSEN, D. W., WARDELL, J. F., BLACK, C. K. & SYKORA, G. B. Deflagration rates of secondary explosives under static MPa-GPa pressure. *AIP Conference Proceedings* **1195**, 420-423 (déc. 2009) (cf. pages 121, 187).
140. ATWOOD, A. I., BOGGS, T. L., CURRAN, P. O., PARR, T. P., HANSON-PARR, D. M., PRICE, C. F. & WIKNICH, J. Burning Rate of Solid Propellant Ingredients, Part 1 : Pressure and Initial Temperature Effects. *Journal of Propulsion and Power* **15**, 740-747 (1999) (cf. pages 121, 168, 169, 170, 187, 188, 189, 194).
141. BENSON, D. J. Volume of fluid interface reconstruction methods for multi-material problems. *Applied Mechanics Reviews* **55**, 151-165 (avr. 2002) (cf. page 122).
142. YOUNGS, D. L. Time-Dependent Multi-Material Flow with Large Fluid Distortion. *Numerical Methods for Fluid Dynamics* (1982) (cf. pages 123, 196).
143. YOUNGS, D. L. An interface tracking method for a 3D Eulerian hydrodynamics code. *Atomic Weapons Research Establishment (AWRE) Technical Report* **44**, 35 (1984) (cf. page 123).
144. SAINCHER, S. & BANERJEE, J. A Redistribution-Based Volume-Preserving PLIC-VOF Technique. *Numerical Heat Transfer, Part B : Fundamentals* **67**, 338-362 (2015) (cf. page 124).
145. RUDMAN, M. Volume-tracking Methods for Interfacial Flow Calculations. *International Journal for Numerical Methods in Fluids* **24**, 671-691 (1997) (cf. page 124).
146. LIOVIC, P., LIOW, J.-L. & RUDMAN, M. A Volume of Fluid (VOF) Method for the Simulation of Metallurgical Flows. *ISIJ International* **41**, 225-233 (2001) (cf. page 124).
147. DUDAY, J. *Simulation numérique de la détonation : Description de l'algorithme calculant les temps d'arrivée de l'onde* rapport technique (CEA DAM, 1979) (cf. page 127).
148. ATTALI, D. *Squelettes et graphes de Voronoï 2D et 3D* Thèses (Université Joseph-Fourier - Grenoble I, oct. 1995) (cf. pages 132, 133).
149. JAMES, E. *The development of plastic-bonded explosives* rapport technique (Lawrence Livermore National Lab.(LLNL), Livermore, CA (United States), 1965) (cf. page 153).
150. MAIENSCHIN, J. L. & WARDELL, J. F. Deflagration Behavior of HMX-Based Explosives at High Temperatures and Pressures (nov. 2003) (cf. page 153).
151. GLASCOE, E., MAIENSCHIN, J., BURNHAM, A., KOERNER, J., HSU, P & WEMHOFF, A. PBXN-9 Ignition Kinetics and Deflagration Rates (avr. 2008) (cf. page 153).

152. ADALSTEINSSON, D. & SETHIAN, J. A. A Fast Level Set Method for Propagating Interfaces. *Journal of Computational Physics* **118**, 269-277 (1995) (cf. page 198).
153. Van BEEST, B. W. H., KRAMER, G. J. & van SANTEN, R. A. Force fields for silicas and aluminophosphates based on ab initio calculations. *Phys. Rev. Lett.* **64**, 1955-1958 (16 1990) (cf. page 198).
154. TARVER, C. M., CHIDESTER, S. K. & NICHOLS, A. L. Critical conditions for impact- and shock-induced hot spots in solid explosives. *The Journal of Physical Chemistry* **100**, 5794-5799 (1996) (cf. pages II, III).
155. FRIEDMAN, G. Particlepack user's manual. *Lawrence Livermore National Laboratory, LLNL-SM-458031* (2011) (cf. page VIII).

Résumé

Ce travail de thèse porte sur la Transition Choc-Détonation (TCD) des explosifs solides à l'échelle mésoscopique. Les explosifs considérés sont des matériaux fortement hétérogènes constitués de cristaux énergétiques mélangés à un liant assurant la cohésion mécanique. Lorsqu'ils sont soumis à un choc (quelques GPa), les réactions chimiques s'initient localement au niveau de sites préférentiels appelés "points chauds", qui conduisent à la mise en détonation de l'explosif. Dans les modèles de TCD classiques, l'explosif est représenté comme un matériau homogène et les points chauds sont pris en compte *via* des paramètres d'ajustement dans une cinétique chimique globale. Néanmoins, une nouvelle approche de modélisation numérique émerge consistant à représenter la microstructure des explosifs afin de résoudre explicitement la formation des points chauds et la croissance des réactions : l'approche mésoscopique. L'objectif de cette thèse est de proposer une modélisation de la TCD à l'échelle mésoscopique et d'étudier sa viabilité à partir de simulations euliennes. Pour cette étude, la composition retenue est l'octogène comprimé.

Une méthodologie a été développée afin de réaliser des simulations mésoscopiques réactives d'un test du coin. Un modèle réactif de régression de surface, inspiré d'études expérimentales d'observation des points chaud de la littérature, a également été réalisé. Il requiert comme donnée d'entrée la vitesse de déflagration des cristaux énergétiques. Ces travaux ont montré qu'une vitesse de déflagration constante ne permet pas de restituer le Pop-Plot expérimental du HMX comprimé. Afin d'obtenir une meilleure modélisation de la TCD, une vitesse de déflagration dépendante de la pression et plus représentative des données de la littérature, a été utilisée. Une relation permettant de reproduire la sensibilité au choc du HMX comprimé, soit le Pop-Plot, a ainsi pu être identifiée. Enfin, l'hypothèse de courbe unique de transition a été vérifiée.

Mots Clés : Détonique / Explosifs / Transition Choc-Détonation / Mésoscopique / Simulations numériques / Microstructure

Abstract

This thesis focusses on the Shock Detonation Transition (SDT) of high explosives at the mesoscale. The materials of interest are highly heterogeneous and are comprised of energetic crystals mixed with a binder. When submitted to a shock wave, chemical reactions appear in localized areas called hotspots, which lead to the detonation of the high explosive. In SDT models, hotspots are generally taken into account through numerical parameters in the explosive burn rate. Nevertheless, new modeling approaches are emerging in which the explosive microstructure and the hotspot formation are explicitly resolved : the mesoscopic approach. The goal of this thesis is to develop a mesoscopic model of the SDT. The explosive studied is the pressed-HMX.

A framework was developed to perform reactive mesoscopic simulations of the wedge test experiment, with a regression surface burn rate, inspired from the observation of hotspots from the literature. This burn rate uses a deflagration speed for the energetic crystals as input data. This work showed that a constant deflagration speed was not adapted to model the SDT of pressed-HMX. Thus, a pressure dependent law was used for the deflagration speed and a methodology was developed to identify the parameters of this law. The Pop-Plot was used as the reference data for the identification of these parameters.

Key words : High Explosives / Shock-to-detonation transition / Mesoscopic, Numerical simulations / Microstructure

