



Conditions de stabilité des détonations multiphasiques et calcul de leur structure interne.

Marie-Hélène Lallemand, Richard Saurel

► **To cite this version:**

Marie-Hélène Lallemand, Richard Saurel. Conditions de stabilité des détonations multiphasiques et calcul de leur structure interne.. [Rapport de recherche] RR-5729, INRIA. 2006, pp.75. inria-00070289

HAL Id: inria-00070289

<https://hal.inria.fr/inria-00070289>

Submitted on 19 May 2006

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.

***Conditions de stabilité des détonations
multiphasiques et calcul de leur structure interne.***

Marie-Hélène Lallemand — Richard Saurel

N° 5729

Octobre 2005

Thème NUM



***Rapport
de recherche***

Conditions de stabilité des détonations multiphasiques et calcul de leur structure interne.

Marie-Hélène Lallemand^{*†}, Richard Saurel^{‡†}

Thème NUM — Systèmes numériques
Projet Smash

Rapport de recherche n° 5729 — Octobre 2005 — 75 pages

Résumé : La stabilité des détonations monophasiques est connue depuis plus d'un siècle. En revanche, les conditions de stabilité des ondes de détonation multiphasiques et leur structure interne sont restées inconnues, par manque de modèle d'écoulement plausible et en raison de l'absence de relations de saut au choc. Sur la base d'un modèle d'écoulement à une seule vitesse et une seule pression (mais plusieurs températures), et de relations de saut appropriées, la détermination de cette structure est désormais possible. Dans ce rapport, on se propose de mettre en place une méthodologie d'analyse et de résolution, en rappelant les deux principaux modèles existant pour le calcul de la structure interne des ondes de détonation monophasiques. Dans le cas particulier où le fluide obéit à une loi des gaz parfaits, on explicite sa solution analytique, et l'on propose un algorithme numérique donnant une solution approchée. Cette méthode sert de base à l'élaboration de celui que l'on utilise pour un fluide multiphasique. Dans ce rapport, nous proposons une détermination de la structure interne des ondes de détonations multiphasiques. Des tests numériques sont effectués pour valider et évaluer à la fois le modèle et le solveur proposés.

Mots-clés : ondes de détonation, écoulements monophasique et multiphasique, gaz réels, explosifs hétérogènes

* Marie-Helene.Lallemand@inria.fr

† SMASH - INRIA Sophia-Antipolis, 2004 route des Lucioles - 06565 Valbonne Cédex

‡ Richard.Saurel@polytech.univ-mrs.fr

Stability conditions of multiphase detonations and resolution of their internal structure.

Abstract: The stability conditions and the structure of single phase detonation waves are known for more than one century. Nevertheless, those of multiphase detonation waves are still unknown. The main reasons lie in the lack of knowledge of appropriate flow model and shock jump conditions. On the basis of a single pressure–single velocity flow model, but with different temperatures, and appropriate jump conditions, the determination of the multiphase detonation wave structure is now possible. In this report, we propose a methodology for analysing and resolving this structure by first recalling the two main models existing for single phase detonation waves. In the particular case of a fluid that obeys the equation of state of an ideal gas, we give the explicit expression of the analytic solution and we propose a numerical algorithm for the approximate solution. This algorithm is the basis for elaborating the algorithm that we use for a multiphase model. In this report, we propose the determination of the internal structure of multiphase detonation waves. Numerical tests are performed, allowing the validation and the evaluation of both our model and solver.

Key-words: detonation waves, monophasic and multiphase flows, real gases, heterogeneous explosives

Table des matières

1	Introduction	5
2	Rappels dans le cas monophasique	5
2.1	Cas monophasique 1-D plan : le modèle ZND	5
2.1.1	Les relations de choc	6
2.1.2	Formulation en variables primitives	7
2.1.3	Conditions sur la surface sonique	9
2.2	Cas monophasique 2-D en cartouche cylindrique suivant l'axe de symétrie : modèle de Wood et Kirkwood (WK)	10
2.2.1	Relations de choc et divergence de l'écoulement	11
2.2.2	Formulation en variables primitives	13
2.2.3	Conditions sur la surface sonique	14
3	Extension au cas multiphasique	15
3.1	Fermeture du modèle d'écoulement	15
3.1.1	Second principe	16
3.1.2	Conservation de l'énergie	17
3.1.3	Egalité des pressions	17
3.2	Cas multiphasique 2-D en cartouche cylindrique suivant l'axe de symétrie : modèle de Wood et Kirkwood étendu.	22
3.2.1	Relations de choc et divergence de l'écoulement.	22
3.2.2	Formulation en variables primitives	23
3.2.3	Conditions sur la surface sonique	26
4	Analyse du modèle	27
4.1	Écoulement plan	28
4.1.1	Écoulement plan hors d'équilibre thermique	28
4.1.2	Écoulement plan en équilibre thermique	28
4.2	Écoulement faiblement divergent	28
4.2.1	Écoulement faiblement divergent hors équilibre thermique	28
4.2.2	Écoulement faiblement divergent en équilibre thermique	29
4.2.3	Écoulement faiblement divergent en équilibre thermique pour des fluides de même comportement thermodynamique	29
5	Résolution numérique	30
5.1	Résolution du modèle ZND	30
5.2	Résolution du modèle WK	34
5.3	Résolution du modèle multiphasique	42
5.3.1	Test 1 : limite monophasique	49
5.3.2	Test 2 : limite monophasique avec échange de chaleur	51
5.3.3	Test 3 : mélange de deux gaz parfaits sans échange de chaleur	51
5.3.4	Test 4 : mélange de deux gaz parfaits avec échange de chaleur	54
5.3.5	Test 6 : mélange d'un gaz parfait et d'un matériau régi par l'équation d'état des gaz raides. Simulations avec et sans échange de chaleur	58

5.3.6	Test 7 : mélange d'un gaz parfait et d'un matériau régi par l'équation d'état des gaz raides en présence d'effets de courbure du front et de transferts de chaleur	59
6	Conclusion	63
A	Détermination de la solution analytique pour le cas 1-D plan, monophasique	65

1 Introduction

Les conditions de stabilité des détonations monophasiques sont connues depuis plus d'un siècle. Leur structure interne a par la suite été déterminée, il y a environ 60 ans. Toutefois, les conditions de stabilité et la structure interne des ondes de détonation multiphasiques sont restées inconnues. Il fallait en effet disposer d'un modèle d'écoulement plausible ainsi que de ses relations de choc. Sur la base du modèle d'écoulement à une seule vitesse et une seule pression (mais plusieurs températures), qui a été proposé récemment, la détermination de cette structure est désormais possible. Dans le présent document on propose d'en effectuer la détermination et de mettre à profit ces informations pour déterminer la cinétique réactionnelle des explosifs hétérogènes.

Le rapport est organisé de la façon suivante. On rappelle tout d'abord le modèle de Zeldovich, Neumann et Doering (ZND) [14, 11, 3], utilisé pour le calcul de la structure interne des ondes de détonation monophasiques. Cette partie sert à structurer les calculs analytiques dans l'optique d'appliquer la même méthodologie aux équations plus complexes du modèle multiphasique. Dans le même esprit, on rappelle ensuite le modèle de Wood et Kirkwood (WK) [13], pour les détonations monophasiques à front courbé. Enfin, on établit le modèle multiphasique en considérant le cas particulier de deux fluides.

On prend soin tout d'abord à sa fermeture en présence de transfert de masse. Il est en effet nécessaire de déterminer une *densité moyenne à l'interface* qui devra assurer une formulation symétrique du modèle en garantissant l'inégalité d'entropie. On formule ensuite ce modèle en un jeu de variables agréables pour l'analyse autant que pour la résolution numérique. Enfin, on réalise la résolution du modèle en établissant un algorithme adapté.

2 Rappels dans le cas monophasique

2.1 Cas monophasique 1-D plan : le modèle ZND

Ce modèle, utilisé dans le cas monophasique 1-D plan, correspond au système d'équations aux dérivées partielles suivant, valables en tout point, y compris au choc

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial(\rho Y_p)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u Y_p)}{\partial x} = \rho \dot{Y}_p, \\ \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} = 0, \\ \frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u^2 + P)}{\partial x} = 0, \\ \frac{\partial(\rho E)}{\partial t} + \frac{\partial[(\rho E + P) u]}{\partial x} = 0. \end{array} \right. \quad (1)$$

Les notations sont classiques : u , P et E désignent respectivement la vitesse, la pression thermodynamique et l'énergie totale du mélange, à l'exception de Y_p qui désigne la fraction massique des produits générés par la combustion (situés dans une zone amont au choc); ρ est la masse volumique du mélange qui contient deux espèces, de fractions massiques Y_p et $Y_r = 1 - Y_p$, puisque la réaction de combustion peut se

résumer schématiquement par

réactifs \longrightarrow produits .

\dot{Y}_p désigne le taux d'apparition de ces produits.

Ce système est fermé par une loi d'état, qui pour l'instant va être considérée sous sa forme la plus simple :

$$P = (\gamma - 1) \rho \mathcal{E} .$$

L'énergie totale du mélange peut s'écrire en effet sous la forme

$$E = e(P, \rho, Y_k) + \frac{1}{2} u^2 ,$$

où

$$e(P, \rho, Y_k) = \mathcal{E}(P, \rho) + \sum_{k=p,r} Y_k e_k^0 , \quad (2)$$

et e_k^0 désigne l'énergie de formation de l'espèce k . L'énergie interne $\mathcal{E}(P, \rho)$ est donc déduite de l'énergie totale par :

$$\mathcal{E}(P, \rho) = E - (e^0 + \frac{1}{2} u^2) ,$$

avec $e^0 = \sum_{k=p,r} Y_k e_k^0$, désignant l'énergie de formation du mélange. Le calcul de la structure interne de l'onde de détonation nécessite les trois ingrédients suivants :

- les relations de passage au travers de l'onde de choc,
- les conditions sur la surface sonique,
- les équations de l'écoulement établies sous une formulation pratique pour permettre leur résolution entre le front de choc et la surface sonique.

Décrivons ces ingrédients.

2.1.1 Les relations de choc

Au travers du choc, les réactions chimiques sont supposées absentes. Les équations de l'écoulement au travers du choc se ramènent alors à

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial (\rho Y_p)}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u Y_p)}{\partial x} = 0 , \\ \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u)}{\partial x} = 0 , \\ \frac{\partial (\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u^2 + P)}{\partial x} = 0 , \\ \frac{\partial (\rho E)}{\partial t} + \frac{\partial [(\rho E + P) u]}{\partial x} = 0 . \end{array} \right. \quad (3)$$

Ce système s'écrit sous la forme conservative

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

pour laquelle les relations de choc s'écrivent $[F(U) - D U] = 0$, où $[f] = f_R - f_L$ désigne le saut de la variable f , f_R (resp. f_L) représentant la valeur de la variable à droite (resp. à gauche) du choc et D désigne la vitesse du choc. On en déduit que

$$\begin{cases} [Y_p] & = 0, \\ [\rho(u - D)] & = 0, \\ [\rho u(u - D) + P] & = 0, \\ [\rho E(u - D) + P u] & = 0. \end{cases} \quad (4)$$

2.1.2 Formulation en variables primitives

La résolution de la structure interne de l'onde est facilitée par l'écriture du système (1) dans le jeu de variables suivant : fraction massique Y_p , masse volumique ρ , vitesse u et pression P qui sont communément appelées variables primitives.

Le système (1) devient, après quelques transformations :

$$\begin{cases} \frac{\partial Y_p}{\partial t} + u \frac{\partial Y_p}{\partial x} = \dot{Y}_p, \\ \frac{\partial \rho}{\partial t} + u \frac{\partial \rho}{\partial x} + \rho \frac{\partial u}{\partial x} = 0, \\ \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x} = 0, \\ \frac{\partial e}{\partial t} + u \frac{\partial e}{\partial x} + \frac{P}{\rho} \frac{\partial u}{\partial x} = 0, \end{cases}$$

dans lequel on a noté $e = e(P, \rho, Y_k)$, avec la définition (2). En introduisant la dérivée lagrangienne

$$\frac{d_u}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial}{\partial x},$$

ce système s'écrit

$$\begin{cases} \frac{d_u Y_p}{dt} = \dot{Y}_p, \\ \frac{d_u \rho}{dt} + \rho \frac{\partial u}{\partial x} = 0, \\ \frac{d_u u}{dt} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x} = 0, \\ \frac{d_u e}{dt} + \frac{P}{\rho} \frac{\partial u}{\partial x} = 0. \end{cases}$$

Compte tenu de la définition précédente, la variation d'énergie s'écrit

$$de = \frac{\partial e}{\partial P} \Big|_{\rho, Y_k} dP + \frac{\partial e}{\partial \rho} \Big|_{P, Y_k} d\rho + \sum_k \frac{\partial e}{\partial Y_k} \Big|_{P, \rho, Y_{k'}} dY_k.$$

Ainsi, l'équation d'énergie devient

$$\frac{\partial e}{\partial P} \Big|_{\rho, Y_k} \frac{d_u P}{dt} + \frac{\partial e}{\partial \rho} \Big|_{P, Y_k} \frac{d_u \rho}{dt} + \sum_k \frac{\partial e}{\partial Y_k} \Big|_{P, \rho, Y_{k'}} \frac{d_u Y_k}{dt} + \frac{P}{\rho} \frac{\partial u}{\partial x} = 0,$$

c'est à dire

$$\frac{d_u P}{dt} + \frac{\frac{P}{\rho} - \rho \frac{\partial e}{\partial \rho} \Big|_{P, Y_k}}{\frac{\partial e}{\partial P} \Big|_{\rho, Y_k}} \frac{\partial u}{\partial x} = - \frac{\sum_k \frac{\partial e}{\partial Y_k} \Big|_{P, \rho, Y_k'} \dot{Y}_k}{\frac{\partial e}{\partial P} \Big|_{\rho, Y_k}} .$$

Vérifions à ce stade quelques propriétés du modèle.

1. La vitesse du son figée est définie par

$$c^2 = \frac{\partial P}{\partial \rho} \Big|_{s, Y_k} .$$

L'identité de Gibbs s'écrit

$$de = T ds - P d\nu + \sum_k \frac{\partial e}{\partial Y_k} \Big|_{P, \nu, Y_k'} dY_k .$$

En travaillant à entropie et fractions massiques constantes elle se réduit à

$$de = -P d\nu ,$$

c'est à dire

$$\frac{\partial e}{\partial P} \Big|_{\rho, Y_k} dP + \frac{\partial e}{\partial \rho} \Big|_{P, Y_k} d\rho = \frac{P}{\rho^2} d\rho .$$

La vitesse du son s'écrit alors

$$c^2 = \frac{\frac{P}{\rho^2} - \frac{\partial e}{\partial \rho} \Big|_{P, Y_k}}{\frac{\partial e}{\partial P} \Big|_{\rho, Y_k}} .$$

L'équation sur la pression devient ainsi

$$\frac{d_u P}{dt} + \rho c^2 \frac{\partial u}{\partial x} = - \frac{\sum_k \frac{\partial e}{\partial Y_k} \Big|_{P, \rho, Y_k'} \dot{Y}_k}{\frac{\partial e}{\partial P} \Big|_{\rho, Y_k}} .$$

2. Le terme de droite de cette équation doit être positif lorsque la réaction se produit. En vertu de la contrainte $Y_p + Y_r = 1$, on a $\dot{Y}_p = -\dot{Y}_r$. Par ailleurs,

$$\frac{\partial e}{\partial Y_k} \Big|_{P, \rho} = e_k^0 .$$

Ainsi

$$- \sum_k \frac{\partial e}{\partial Y_k} \Big|_{P, \rho} \dot{Y}_k = - (e_p^0 - e_r^0) \dot{Y}_p .$$

La réaction réactifs \rightarrow produits, est nécessairement exothermique, donc

$$e_p^0 - e_r^0 = -q ,$$

avec $q > 0$. L'équation en pression devient alors

$$\frac{d_u P}{dt} + \rho c^2 \frac{\partial u}{\partial x} = \frac{q \dot{Y}_p}{\frac{\partial e}{\partial P} \Big|_{\rho, Y_k}} .$$

Pour des raisons de stabilité thermodynamique, $\left. \frac{\partial e}{\partial P} \right|_{\rho, Y_k} > 0$. Pour l'équation d'état modèle $\left. \frac{\partial e}{\partial P} \right|_{\rho, Y_k} = \frac{1}{\rho(\gamma-1)}$. Comme par ailleurs, $\dot{Y}_p \geq 0$, on en conclut que l'évolution de la pression est nécessairement positive.

Le système d'équations en variables primitives s'écrit ainsi

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d_u Y_p}{dt} = \dot{Y}_p, \\ \frac{d_u \rho}{dt} + \rho \frac{\partial u}{\partial x} = 0, \\ \frac{d_u u}{dt} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x} = 0, \\ \frac{d_u P}{dt} + \rho c^2 \frac{\partial u}{\partial x} = q \dot{Y}_p \left. \frac{\partial P}{\partial e} \right|_{\rho, Y_k}. \end{array} \right.$$

2.1.3 Conditions sur la surface sonique

Ces équations sont invariantes par translation Galiléenne. Ainsi, dans le repère du choc, elles s'écrivent

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d_{\bar{u}} Y_p}{dt} = \dot{Y}_p, \\ \frac{d_{\bar{u}} \rho}{dt} + \rho \frac{\partial \bar{u}}{\partial x} = 0, \\ \frac{d_{\bar{u}} \bar{u}}{dt} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x} = 0, \\ \frac{d_{\bar{u}} P}{dt} + \rho c^2 \frac{\partial \bar{u}}{\partial x} = q \dot{Y}_p \left. \frac{\partial P}{\partial e} \right|_{\rho, Y_k}, \end{array} \right.$$

avec $\bar{u} = D - u$. L'opérateur lagrangien est devenu

$$\frac{d_{\bar{u}}}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial}{\partial x}.$$

En considérant l'onde stationnaire pour l'écoulement attaché à son repère, ce système devient un système différentiel ordinaire

$$\left\{ \begin{array}{l} \bar{u} \frac{dY_p}{dx} = \dot{Y}_p, \\ \bar{u} \frac{d\rho}{dx} + \rho \frac{d\bar{u}}{dx} = 0, \\ \bar{u} \frac{d\bar{u}}{dx} + \frac{1}{\rho} \frac{dP}{dx} = 0, \\ \bar{u} \frac{dP}{dx} + \rho c^2 \frac{d\bar{u}}{dx} = q \dot{Y}_p \left. \frac{dP}{de} \right|_{\rho, Y_k}. \end{array} \right.$$

En combinant les deux dernières équations on obtient

$$\rho (c^2 - \bar{u}^2) \frac{d\bar{u}}{dx} = q \dot{Y}_p \left. \frac{dP}{de} \right|_{\rho, Y_k}.$$

On peut alors présenter le système différentiel précédent sous la forme

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho (c^2 - \bar{u}^2) \frac{d\bar{u}}{dx} = q \dot{Y}_p \frac{dP}{de} \Big|_{\rho, Y_k}, \\ \frac{d\rho}{dx} = -\frac{\rho}{\bar{u}} \frac{d\bar{u}}{dx}, \\ \frac{dP}{dx} = -\rho \bar{u} \frac{d\bar{u}}{dx}, \\ \frac{dY_p}{dx} = \frac{\dot{Y}_p}{\bar{u}}. \end{array} \right. \quad (5)$$

Dans ce système, tous les membres de droite sont des termes sources, puisque que la divergence de la vitesse évolue elle même au moyen d'un terme source, comme nous l'indique la première équation.

Ce sont ces équations, sous la forme (5) qu'il faut résoudre entre le front de choc et la surface sonique. D'après la première équation, lorsque $\bar{u} = c$, la seule possibilité physique est que l'on soit en fin de réaction $\dot{Y}_p = 0$, inversement, si le taux de réaction est nul, i.e. si le membre de droite est nul, alors, nécessairement, $\bar{u}^2 = c^2$ est la seule possibilité physique. On en déduit que la condition sur la surface sonique est précisément que

$$\dot{Y}_p = 0 \quad (6)$$

lorsque $c^2 = \bar{u}^2$. Ces conditions correspondent précisément aux conditions de Chapman Jouguet [1, 8] qui sont ici retrouvées. Nous renvoyons à l'annexe A pour l'explicitation de la solution analytique dans le cas particulier de l'équation d'état des gaz parfait.

2.2 Cas monophasique 2-D en cartouche cylindrique suivant l'axe de symétrie : modèle de Wood et Kirkwood (WK)

Le système de départ est dans ce cas

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial (\rho Y_p)}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u Y_p)}{\partial x} + \frac{\partial (\rho w Y_p)}{\partial r} + \frac{(\rho w Y_p)}{r} = \rho \dot{Y}_p, \\ \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial (\rho w)}{\partial r} + \frac{(\rho w)}{r} = 0, \\ \frac{\partial (\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u^2 + P)}{\partial x} + \frac{\partial (\rho u w)}{\partial r} + \frac{(\rho u w)}{r} = 0, \\ \frac{\partial (\rho w)}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u w)}{\partial x} + \frac{\partial (\rho w^2 + P)}{\partial r} + \frac{(\rho w^2)}{r} = 0, \\ \frac{\partial (\rho E)}{\partial t} + \frac{\partial [(\rho E + P) u]}{\partial x} + \frac{\partial [(\rho E + P) w]}{\partial r} + \frac{(\rho E + P) w}{r} = 0. \end{array} \right. \quad (7)$$

L'énergie totale est maintenant définie par

$$E = \mathcal{E}(P, \rho) + \sum_{k=p,r} Y_k e_k^0 + \frac{1}{2} (u^2 + w^2).$$

En se plaçant le long de l'axe de symétrie de la cartouche, ces équations se simplifient. En effet, la vitesse radiale le long de l'axe est nulle $w(r=0) = 0$ et le rapport de cette

vitesse sur le rayon le long de l'axe se ramène à sa divergence (règle de l'Hospital), que l'on notera par la suite \hat{w}_0 .

$$\lim_{r \rightarrow 0} \frac{w}{r} = \lim_{r \rightarrow 0} \frac{w(r) - w(0)}{r} = \frac{\partial w}{\partial r}(r=0) = \hat{w}_0 .$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial (\rho Y_p)}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u Y_p)}{\partial x} + 2 \rho Y_p \hat{w}_0 = \rho \dot{Y}_p , \\ \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u)}{\partial x} + 2 \rho \hat{w}_0 = 0 , \\ \frac{\partial (\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u^2 + P)}{\partial x} + 2 \rho u \hat{w}_0 = 0 , \\ \frac{\partial P}{\partial r} = 0 , \\ \frac{\partial (\rho E)}{\partial t} + \frac{\partial [(\rho E + P) u]}{\partial x} + 2 (\rho E + P) \hat{w}_0 = 0 . \end{array} \right.$$

Comme précédemment, le calcul de la structure interne de l'onde de détonation nécessite trois ingrédients:

- les relations de passage au travers de l'onde de choc,
- les conditions sur la surface sonique,
- les équations de l'écoulement sous une forme pratique pour leur résolution entre le front de choc et la surface sonique.

Une information supplémentaire est nécessaire. Elle concerne la détermination de la divergence de la vitesse $\hat{w}_0 = \left. \frac{\partial w}{\partial r} \right)_{r=0}$ sur l'axe de symétrie.

Examinons ces ingrédients.

2.2.1 Relations de choc et divergence de l'écoulement

L'onde de choc se propage suivant la normale à son front, qui sur l'axe de symétrie correspond à cet axe. Avant le passage de l'onde, l'écoulement n'a aucune vitesse. La projection des relations de saut sur l'axe de symétrie conduit aux relations

$$\left\{ \begin{array}{l} [Y_p] = 0 , \\ [w] = 0 , \\ [\rho (u - D)] = 0 , \\ [\rho u (u - D) + P] = 0 , \\ [\rho E (u - D) + P u] = 0 . \end{array} \right.$$

La deuxième relation permet de confirmer que $w(r=0) = 0$ après le passage immédiat de l'onde. Par la suite, cette vitesse reste nulle pour des raisons de symétrie.

La divergence de l'écoulement est par contre non nulle puisque les détonations considérées sont supposées cylindriques et faiblement divergentes. On considère un front de détonation se propageant à la vitesse D possédant un rayon de courbure R , comme représenté sur la figure 1.

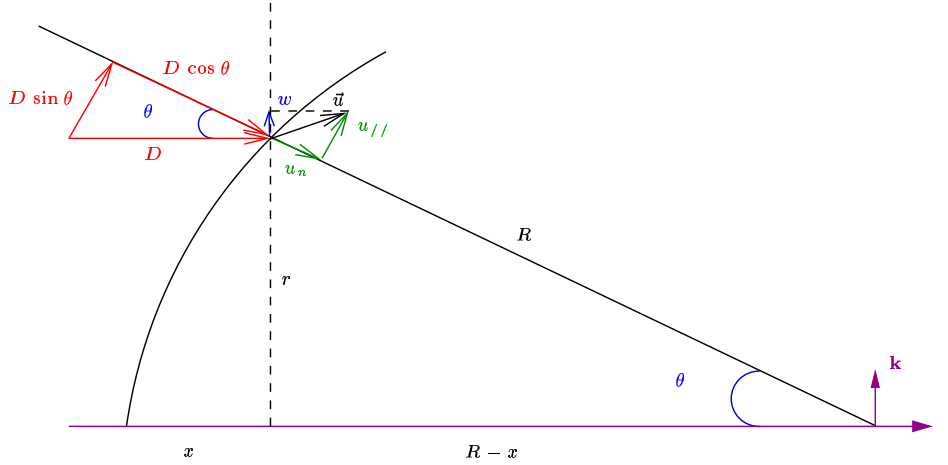


FIG. 1 – Représentation du diagramme des vitesses pour un point d'écoulement proche de l'axe de symétrie dans le contexte d'un front d'onde courbé.

Dans ces conditions, les vitesses normales et tangentielles de l'écoulement au front de choc s'expriment

$$\begin{cases} \vec{u}_n = |\vec{u}_n| (\cos \theta \mathbf{i} - \sin \theta \mathbf{k}) , \\ \vec{u}_{//} = |\vec{u}_{//}| (\sin \theta \mathbf{i} + \cos \theta \mathbf{k}) , \end{cases}$$

donc

$$\vec{u} = \left(|\vec{u}_{//}| \sin \theta + |\vec{u}_n| \cos \theta \right) \mathbf{i} + \left(|\vec{u}_{//}| \cos \theta - |\vec{u}_n| \sin \theta \right) \mathbf{k} ,$$

et ainsi

$$w = |\vec{u}_{//}| \cos \theta - |\vec{u}_n| \sin \theta = \frac{r}{R} (D \cos \theta - |\vec{u}_n|) .$$

$|\vec{u}_n|$ est fonction de la vitesse initiale $D \cos \theta$, perpendiculaire au choc par l'intermédiaire des relations d'Hugoniot. En écrivant un développement en série de Taylor de la vitesse normale $|\vec{u}_n|$, autour de $|\vec{u}_n|(D)$ on a

$$|\vec{u}_n|(D - \varepsilon) = |\vec{u}_n|(D) - \varepsilon \left(\frac{d|\vec{u}_n|}{dD} \right)_H (D) + \frac{\varepsilon^2}{2} \left(\frac{d^2|\vec{u}_n|}{dD^2} \right)_H (D) + \dots$$

On injecte cette expression dans l'expression de w , puis on élimine $\cos \theta$ à l'aide de son développement en série

$$\cos \theta = \left(1 - \sin^2 \theta \right)^{\frac{1}{2}} = \left(1 - \left(\frac{r}{R} \right)^2 \right)^{\frac{1}{2}} = 1 - \frac{1}{2} \left(\frac{r}{R} \right)^2 - \frac{1}{8} \left(\frac{r}{R} \right)^4 + \dots$$

On obtient

$$w = \left(\frac{r}{R} \right) (D - |\vec{u}_n|(x=0)) - \frac{1}{2} D \left(\frac{r}{R} \right)^8 \left[1 + \left(\frac{d|\vec{u}_n|}{dD} \right)_H \right] + \dots$$

En se limitant au terme d'ordre 1 pour w , on obtient pour \hat{w}_0

$$\hat{w}_0 = \frac{(D - |\vec{u}_n|(x=0))}{R} . \quad (8)$$

Cette démonstration peut être trouvée dans Fickett et Davis (1979, [5], pp. 208–210).

2.2.2 Formulation en variables primitives

Le système (7) devient, après quelques transformations

$$\begin{cases} \frac{d_u Y_p}{dt} = \dot{Y}_p, \\ \frac{d_u \rho}{dt} + \rho \frac{\partial u}{\partial x} = -2 \rho \hat{w}_0, \\ \frac{d_u u}{dt} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x} = 0, \\ \frac{d_u e}{dt} + \frac{P}{\rho} \frac{\partial u}{\partial x} = -2 \frac{P}{\rho} \hat{w}_0. \end{cases}$$

La dernière équation peut aussi s'écrire

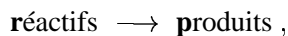
$$\frac{d_u e}{dt} + P \frac{d_u \nu}{dt} = 0,$$

avec $\nu = 1/\rho$, le volume spécifique.

Compte tenu de la définition précédente de l'énergie interne, l'équation en pression s'écrit

$$\frac{d_u P}{dt} + \rho c^2 \frac{\partial u}{\partial x} = -2 \rho c^2 \hat{w}_0 - \frac{\sum_k \frac{\partial e}{\partial Y_k} \Big|_{P, \rho, Y_k} \dot{Y}_k}{\frac{\partial e}{\partial P} \Big|_{\rho, Y_k}}.$$

Lorsque la réaction se réduit à un processus simple



on obtient, avec les notations du modèle ZND

$$\frac{d_u p}{dt} + \rho c^2 \frac{\partial u}{\partial x} = \frac{q \dot{Y}_p}{\frac{\partial e}{\partial P} \Big|_{\rho, Y_k}} - 2 \rho c^2 \hat{w}_0.$$

Le système d'équations en variables primitives s'écrit alors

$$\begin{cases} \frac{d_u Y_p}{dt} = \dot{Y}_p, \\ \frac{d_u \rho}{dt} + \rho \frac{\partial u}{\partial x} = -2 \rho \hat{w}_0, \\ \frac{d_u u}{dt} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x} = 0, \\ \frac{d_u P}{dt} + \rho c^2 \frac{\partial u}{\partial x} = q \dot{Y}_p \frac{\partial P}{\partial e} \Big|_{\rho, Y_k} - 2 \rho c^2 \hat{w}_0. \end{cases}$$

2.2.3 Conditions sur la surface sonique

Ces équations sont invariantes par translation Galiléenne. Ainsi, dans le repère du choc elles s'écrivent

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d\bar{u}Y_p}{dt} = \dot{Y}_p, \\ \frac{d\bar{u}\rho}{dt} + \rho \frac{\partial\bar{u}}{\partial x} = -2\rho\hat{w}_0, \\ \frac{d\bar{u}\bar{u}}{dt} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x} = 0, \\ \frac{d\bar{u}P}{dt} + \rho c^2 \frac{\partial\bar{u}}{\partial x} = q \dot{Y}_p \left. \frac{\partial P}{\partial e} \right|_{\rho, Y_k} - 2\rho c^2 \hat{w}_0, \end{array} \right.$$

avec $\bar{u} = D - u$. L'opérateur lagrangien est devenu

$$\frac{d\bar{u}}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial}{\partial x}.$$

En considérant l'onde stationnaire pour l'écoulement attaché à son repère, ce système devient

$$\left\{ \begin{array}{l} \bar{u} \frac{dY_p}{dx} = \dot{Y}_p, \\ \bar{u} \frac{d\rho}{dx} + \rho \frac{d\bar{u}}{dx} = -2\rho\hat{w}_0, \\ \bar{u} \frac{d\bar{u}}{dx} + \frac{1}{\rho} \frac{dP}{dx} = 0, \\ \bar{u} \frac{dP}{dx} + \rho c^2 \frac{d\bar{u}}{dx} = q \dot{Y}_p \left. \frac{\partial P}{\partial e} \right|_{\rho, Y_k} - 2\rho c^2 \hat{w}_0. \end{array} \right.$$

En combinant les deux dernières équations on obtient

$$\frac{d\bar{u}}{dx} = \frac{q \dot{Y}_p \left. \frac{\partial P}{\partial e} \right|_{\rho, Y_k} - 2\rho c^2 \hat{w}_0}{\rho (c^2 - \bar{u}^2)}.$$

On peut alors présenter le système différentiel précédent sous la forme

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d\bar{u}}{dx} = \frac{q \dot{Y}_p \left. \frac{\partial P}{\partial e} \right|_{\rho, Y_k} - 2\rho c^2 \hat{w}_0}{\rho (c^2 - \bar{u}^2)}, \\ \frac{d\rho}{dx} = -\frac{\rho}{\bar{u}} \left(\frac{d\bar{u}}{dx} + 2\hat{w}_0 \right), \\ \frac{dP}{dx} = -\rho \bar{u} \frac{d\bar{u}}{dx}, \\ \frac{dY_p}{dx} = \frac{\dot{Y}_p}{\bar{u}}. \end{array} \right. \quad (9)$$

Les conditions sur la surface sonique sont alors

$$q \dot{Y}_p \left. \frac{\partial P}{\partial e} \right|_{\rho, Y_k} - 2\rho c^2 \hat{w}_0 = 0,$$

lorsque $c^2 = \bar{u}^2$. Ces conditions correspondent précisément aux conditions de Wood et Kirkwood.

3 Extension au cas multiphasique

Les détonations multiphasiques ont fait l'objet de nombreuses études. La plupart considèrent la phase solide comme incompressible [4]. Dans la présente approche, la compressibilité de toutes les phases est prise en compte, ce qui est nécessaire en raison des niveaux de pression extrêmes atteints dans les régimes de détonation des matériaux considérés.

Dans ce qui suit, on se restreint au cas diphasique, pour des raisons de simplicité dans la présentation et la compréhension du modèle.

3.1 Fermeture du modèle d'écoulement

En absence de transfert de masse, mais en présence de transfert de chaleur, un modèle d'écoulement diphasique homocinétique et à une seule pression peut être obtenu. Sa détermination a été réalisée par analyse asymptotique dans la limite de grands coefficients de relaxation (vitesse et pression) d'un modèle diphasique hors d'équilibre à sept équations [2]. La méthode de réduction asymptotique est détaillée par Guillard et al. [7]. Ce système s'écrit

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \alpha_1}{\partial t} + \vec{u} \cdot \text{grad}(\alpha_1) = \\ \frac{\alpha_1 \alpha_2}{\alpha_2 \rho_1 c_1^2 + \alpha_1 \rho_2 c_2^2} \left[(\rho_2 c_2^2 - \rho_1 c_1^2) \text{div}(\vec{u}) + H(T_2 - T_1) \left(\frac{\Gamma_1}{\alpha_1} + \frac{\Gamma_2}{\alpha_2} \right) \right], \\ \frac{\partial (\alpha \rho)_1}{\partial t} + \text{div}((\alpha \rho)_1 \vec{u}) = 0, \\ \frac{\partial (\alpha \rho)_2}{\partial t} + \text{div}((\alpha \rho)_2 \vec{u}) = 0, \\ \frac{\partial (\rho u)}{\partial t} + \text{div}(\rho \vec{u} \otimes \vec{u}) + \text{grad}(P) = 0, \\ \frac{\partial (\rho E)}{\partial t} + \text{div}(\vec{u}(\rho E + P)) = 0. \end{array} \right.$$

Le paramètre positif H contrôle la vitesse à laquelle les températures relaxent vers l'équilibre. Ce modèle est apte au traitement des problèmes à interfaces (entre différents fluides) et à la propagation d'ondes dans les mélanges. Il constitue le point de départ de l'analyse qui suit.

L'ajout de termes de transfert de masse va venir modifier les équations de masse

$$\begin{aligned} \frac{\partial (\alpha \rho)_1}{\partial t} + \text{div}((\alpha \rho)_1 \vec{u}) &= \dot{m}_1, \\ \frac{\partial (\alpha \rho)_2}{\partial t} + \text{div}((\alpha \rho)_2 \vec{u}) &= -\dot{m}_1, \end{aligned}$$

où $\dot{m}_1 = \rho \dot{Y}_1$. En vertu de l'équation de masse du mélange, ces deux équations peuvent être mises sous la forme

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d_{\vec{u}} \dot{Y}_1}{dt} = \dot{Y}_1, \\ \frac{d_{\vec{u}} \dot{Y}_2}{dt} = -\dot{Y}_1, \end{array} \right. \quad (10)$$

où

$$\frac{d_{\vec{u}}}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \vec{u} \cdot \text{grad} .$$

L'équation d'évolution de la fraction volumique devient

$$\begin{aligned} \frac{d_{\vec{u}}(\alpha_1)}{dt} = & \frac{\alpha_1 \alpha_2}{\alpha_2 \rho_1 c_1^2 + \alpha_1 \rho_2 c_2^2} \left[(\rho_2 c_2^2 - \rho_1 c_1^2) \text{div}(\vec{u}) + H(T_2 - T_1) \left(\frac{\Gamma_1}{\alpha_1} + \frac{\Gamma_2}{\alpha_2} \right) \right] + \\ & + \frac{\rho \dot{Y}_1}{\rho_I} , \end{aligned} \quad (11)$$

avec la densité d'interface ρ_I qu'il va falloir préciser.

L'analyse qui suit porte précisément sur la détermination de cette densité à l'interface, lieu où le transfert de masse s'opère. Cette difficulté avait déjà été répertoriée dans Chinnayya et al. [2] dans le cadre du modèle à 7 équations, et le choix qui avait été retenu, de façon un peu arbitraire, était $\rho_I = \rho_s$ où ρ_s représente la densité de la phase la moins compressible.

On propose ci-après d'améliorer la précision de cette estimation à l'aide d'une analyse basée sur le second principe de la thermodynamique.

3.1.1 Second principe

L'inégalité d'entropie s'écrit

$$\frac{\partial \rho s}{\partial t} + \text{div}(\rho s \vec{u}) \geq 0 ,$$

où s désigne l'entropie du mélange définie par

$$s = Y_1 s_1 + Y_2 s_2 .$$

L'inégalité précédente peut s'écrire

$$\rho \frac{d_{\vec{u}} s}{dt} \geq 0$$

qui devient, compte tenu de la définition de s

$$Y_1 \frac{d_{\vec{u}} s_1}{dt} + Y_2 \frac{d_{\vec{u}} s_2}{dt} + (s_1 - s_2) \dot{Y}_1 \geq 0 . \quad (12)$$

Pour utiliser cette inégalité, il nous faut exprimer les deux fonctions $\frac{d_{\vec{u}} s_1}{dt}$ et $\frac{d_{\vec{u}} s_2}{dt}$ à l'aide de variables déterminées par le modèle. Pour ce faire, nous allons utiliser

- la conservation de l'énergie du mélange,
- la condition d'égalité des pressions entre phases.

3.1.2 Conservation de l'énergie

La combinaison de l'équation d'énergie

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

avec l'équation du mouvement

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

conduit à une forme plus pratique de l'équation d'énergie

$$\frac{d_{\vec{u}} e}{dt} + P \frac{d_{\vec{u}} \nu}{dt} = 0 , \quad (13)$$

avec l'énergie interne de mélange définie par

$$e = Y_1 e_1 + Y_2 e_2 ,$$

et le volume spécifique de mélange, défini par

$$\nu = Y_1 \nu_1 + Y_2 \nu_2 .$$

L'équation (13) devient alors

$$Y_1 \left(\frac{d_{\vec{u}} e_1}{dt} + P \frac{d_{\vec{u}} \nu_1}{dt} \right) + Y_2 \left(\frac{d_{\vec{u}} e_2}{dt} + P \frac{d_{\vec{u}} \nu_2}{dt} \right) + (h_1 - h_2) \dot{Y}_1 = 0 .$$

L'utilisation de l'identité de Gibbs pour chaque phase permet d'écrire ($k = 1, 2$)

$$T_k \frac{d_{\vec{u}} s_k}{dt} = \frac{d_{\vec{u}} e_k}{dt} + P \frac{d_{\vec{u}} \nu_k}{dt} .$$

La conservation de l'énergie devient alors

$$Y_1 T_1 \frac{d_{\vec{u}} s_1}{dt} + Y_2 T_2 \frac{d_{\vec{u}} s_2}{dt} + (h_1 - h_2) \dot{Y}_1 = 0 . \quad (14)$$

Cette dernière équation fait intervenir les deux fonctions $\frac{d_{\vec{u}} s_1}{dt}$ et $\frac{d_{\vec{u}} s_2}{dt}$ que nous cherchons à déterminer. Leur détermination nécessite une deuxième équation, qui porte sur l'équilibre des pressions entre phases.

3.1.3 Egalité des pressions

Le mélange évolue en équilibre des pressions. Les lois d'état peuvent être écrites comme fonction de la masse volumique et de l'entropie. Ainsi, la condition d'équilibre mécanique s'écrit

$$P_1(\rho_1, s_1) = P_2(\rho_2, s_2) . \quad (15)$$

L'écriture différentielle de cette condition, le long d'une trajectoire fluide s'écrit

$$\left. \frac{\partial P_1}{\partial \rho_1} \right|_{s_1} \frac{d_{\vec{u}} \rho_1}{dt} + \left. \frac{\partial P_1}{\partial s_1} \right|_{\rho_1} \frac{d_{\vec{u}} s_1}{dt} = \left. \frac{\partial P_2}{\partial \rho_2} \right|_{s_2} \frac{d_{\vec{u}} \rho_2}{dt} + \left. \frac{\partial P_2}{\partial s_2} \right|_{\rho_2} \frac{d_{\vec{u}} s_2}{dt} .$$

Or

$$\left. \frac{\partial P_k}{\partial \rho_k} \right|_{s_k} = c_k^2,$$

et

$$\left. \frac{\partial P_k}{\partial s_k} \right|_{\rho_k} = \rho_k \Gamma_k T_k.$$

On obtient ainsi une deuxième équation faisant intervenir les deux fonctions ($\frac{d_{\vec{u}} s_1}{dt}$ et $\frac{d_{\vec{u}} s_2}{dt}$) à déterminer :

$$c_1^2 \frac{d_{\vec{u}} \rho_1}{dt} + \rho_1 \Gamma_1 T_1 \frac{d_{\vec{u}} s_1}{dt} = c_2^2 \frac{d_{\vec{u}} \rho_2}{dt} + \rho_2 \Gamma_2 T_2 \frac{d_{\vec{u}} s_2}{dt}. \quad (16)$$

Les équations (14) et (16) forment alors un système de deux équations à deux inconnues

$$\begin{cases} Y_1 T_1 \frac{d_{\vec{u}} s_1}{dt} + Y_2 T_2 \frac{d_{\vec{u}} s_2}{dt} + (h_1 - h_2) \dot{Y}_1 = 0, \\ c_1^2 \frac{d_{\vec{u}} \rho_1}{dt} + \rho_1 \Gamma_1 T_1 \frac{d_{\vec{u}} s_1}{dt} = c_2^2 \frac{d_{\vec{u}} \rho_2}{dt} + \rho_2 \Gamma_2 T_2 \frac{d_{\vec{u}} s_2}{dt}, \end{cases}$$

dont la résolution conduit à

$$\begin{cases} \frac{(\alpha \rho)_1 (\alpha \rho)_2}{\rho} T_1 \left(\frac{\Gamma_1}{\alpha_1} + \frac{\Gamma_2}{\alpha_2} \right) \frac{d_{\vec{u}} s_1}{dt} = Y_2 \left(c_2^2 \frac{d_{\vec{u}} \rho_2}{dt} - c_1^2 \frac{d_{\vec{u}} \rho_1}{dt} \right) - \rho_2 \Gamma_2 (h_1 - h_2) \dot{Y}_1, \\ \frac{(\alpha \rho)_1 (\alpha \rho)_2}{\rho} T_2 \left(\frac{\Gamma_1}{\alpha_1} + \frac{\Gamma_2}{\alpha_2} \right) \frac{d_{\vec{u}} s_2}{dt} = -Y_1 \left(c_2^2 \frac{d_{\vec{u}} \rho_2}{dt} - c_1^2 \frac{d_{\vec{u}} \rho_1}{dt} \right) - \rho_1 \Gamma_1 (h_1 - h_2) \dot{Y}_1. \end{cases} \quad (17)$$

Afin d'éliminer les variations $\frac{d_{\vec{u}} \rho_1}{dt}$ et $\frac{d_{\vec{u}} \rho_2}{dt}$ pour faire apparaître des fonctions de la fraction volumique (faisant intervenir l'inconnue ρ_I), on va utiliser les deux équations de masse sous la forme

$$\begin{cases} \frac{\partial (\alpha \rho)_1}{\partial t} + \operatorname{div} ((\alpha \rho)_1 \vec{u}) = \rho \dot{Y}_1, \\ \frac{\partial (\alpha \rho)_2}{\partial t} + \operatorname{div} ((\alpha \rho)_2 \vec{u}) = -\rho \dot{Y}_1. \end{cases}$$

Ces équations se transforment comme suit

$$\begin{cases} \frac{d_{\vec{u}} \rho_1}{dt} = -\frac{\rho_1}{\alpha_1} \frac{d_{\vec{u}} \alpha_1}{dt} - \rho_1 \operatorname{div} (\vec{u}) + \frac{\rho \dot{Y}_1}{\alpha_1}, \\ \frac{d_{\vec{u}} \rho_2}{dt} = \frac{\rho_2}{\alpha_2} \frac{d_{\vec{u}} \alpha_1}{dt} - \rho_2 \operatorname{div} (\vec{u}) - \frac{\rho \dot{Y}_1}{\alpha_2}. \end{cases}$$

Les deux équations de (17) deviennent alors

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{(\alpha \rho)_1 (\alpha \rho)_2}{\rho} T_1 \left(\frac{\Gamma_1}{\alpha_1} + \frac{\Gamma_2}{\alpha_2} \right) \frac{d_{\vec{u}} s_1}{dt} = \\ \quad Y_2 \left(\left(\frac{\rho_1 c_1^2}{\alpha_1} + \frac{\rho_2 c_2^2}{\alpha_2} \right) \frac{d_{\vec{u}} \alpha_1}{dt} - (\rho_2 c_2^2 - \rho_1 c_1^2) \operatorname{div}(\vec{u}) \right) \\ \quad - \rho Y_2 \left(\frac{c_1^2}{\alpha_1} + \frac{c_2^2}{\alpha_2} \right) \dot{Y}_1 - \rho_2 \Gamma_2 (h_1 - h_2) \dot{Y}_1, \\ \frac{(\alpha \rho)_1 (\alpha \rho)_2}{\rho} T_2 \left(\frac{\Gamma_1}{\alpha_1} + \frac{\Gamma_2}{\alpha_2} \right) \frac{d_{\vec{u}} s_2}{dt} = \\ \quad - Y_1 \left(\left(\frac{\rho_1 c_1^2}{\alpha_1} + \frac{\rho_2 c_2^2}{\alpha_2} \right) \frac{d_{\vec{u}} \alpha_1}{dt} - (\rho_2 c_2^2 - \rho_1 c_1^2) \operatorname{div}(\vec{u}) \right) \\ \quad + \rho Y_1 \left(\frac{c_1^2}{\alpha_1} + \frac{c_2^2}{\alpha_2} \right) \dot{Y}_1 - \rho_1 \Gamma_1 (h_1 - h_2) \dot{Y}_1, \end{array} \right.$$

Comme l'équation sur la fraction volumique (11) s'écrit

$$\frac{d_{\vec{u}} \alpha_1}{dt} = \frac{\alpha_1 \alpha_2}{\alpha_2 \rho_1 c_1^2 + \alpha_1 \rho_2 c_2^2} \left[(\rho_2 c_2^2 - \rho_1 c_1^2) \operatorname{div}(\vec{u}) + H (T_2 - T_1) \left(\frac{\Gamma_1}{\alpha_1} + \frac{\Gamma_2}{\alpha_2} \right) \right] + \frac{\rho \dot{Y}_1}{\rho_I},$$

on déduit

$$\begin{aligned} \left(\frac{\rho_1 c_1^2}{\alpha_1} + \frac{\rho_2 c_2^2}{\alpha_2} \right) \frac{d_{\vec{u}} \alpha_1}{dt} - (\rho_2 c_2^2 - \rho_1 c_1^2) \operatorname{div}(\vec{u}) = \\ H (T_2 - T_1) \left(\frac{\Gamma_1}{\alpha_1} + \frac{\Gamma_2}{\alpha_2} \right) + \frac{\rho}{\rho_I} \dot{Y}_1 \left(\frac{\rho_1 c_1^2}{\alpha_1} + \frac{\rho_2 c_2^2}{\alpha_2} \right). \end{aligned}$$

Ainsi, les équations d'entropie deviennent

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{(\alpha \rho)_1 (\alpha \rho)_2}{\rho} T_1 \left(\frac{\Gamma_1}{\alpha_1} + \frac{\Gamma_2}{\alpha_2} \right) \frac{d_{\vec{u}} s_1}{dt} = \\ \quad Y_2 \left(H (T_2 - T_1) \left(\frac{\Gamma_1}{\alpha_1} + \frac{\Gamma_2}{\alpha_2} \right) + \frac{\rho}{\rho_I} \dot{Y}_1 \left(\frac{\rho_1 c_1^2}{\alpha_1} + \frac{\rho_2 c_2^2}{\alpha_2} \right) \right) \\ \quad - \rho Y_2 \left(\frac{c_1^2}{\alpha_1} + \frac{c_2^2}{\alpha_2} \right) \dot{Y}_1 - \rho_2 \Gamma_2 (h_1 - h_2) \dot{Y}_1, \\ \frac{(\alpha \rho)_1 (\alpha \rho)_2}{\rho} T_2 \left(\frac{\Gamma_1}{\alpha_1} + \frac{\Gamma_2}{\alpha_2} \right) \frac{d_{\vec{u}} s_2}{dt} = \\ \quad - Y_1 \left(H (T_2 - T_1) \left(\frac{\Gamma_1}{\alpha_1} + \frac{\Gamma_2}{\alpha_2} \right) + \frac{\rho}{\rho_I} \dot{Y}_1 \left(\frac{\rho_1 c_1^2}{\alpha_1} + \frac{\rho_2 c_2^2}{\alpha_2} \right) \right) \\ \quad + \rho Y_1 \left(\frac{c_1^2}{\alpha_1} + \frac{c_2^2}{\alpha_2} \right) \dot{Y}_1 - \rho_1 \Gamma_1 (h_1 - h_2) \dot{Y}_1. \end{array} \right.$$

Elles peuvent s'écrire sous une forme plus utile pour la suite

$$\begin{cases} Y_1 \frac{d_{\bar{v}} s_1}{dt} = \frac{H(T_2 - T_1)}{\rho T_1} + \frac{\dot{Y}_1}{T_1 \left(\frac{\Gamma_1}{\alpha_1} + \frac{\Gamma_2}{\alpha_2} \right)} \left(\frac{\frac{\rho_1 c_1^2}{\alpha_1} + \frac{\rho_2 c_2^2}{\alpha_2}}{\rho_I} - \left(\frac{c_1^2}{\alpha_1} + \frac{c_2^2}{\alpha_2} \right) - \frac{\Gamma_2}{\alpha_2} (h_1 - h_2) \right), \\ Y_2 \frac{d_{\bar{v}} s_2}{dt} = -\frac{H(T_2 - T_1)}{\rho T_2} + \frac{\dot{Y}_1}{T_2 \left(\frac{\Gamma_1}{\alpha_1} + \frac{\Gamma_2}{\alpha_2} \right)} \left(-\frac{\frac{\rho_1 c_1^2}{\alpha_1} + \frac{\rho_2 c_2^2}{\alpha_2}}{\rho_I} + \left(\frac{c_1^2}{\alpha_1} + \frac{c_2^2}{\alpha_2} \right) - \frac{\Gamma_1}{\alpha_1} (h_1 - h_2) \right). \end{cases}$$

On est maintenant en mesure d'injecter ces résultats dans l'inégalité d'entropie (12)

$$\begin{aligned} & \frac{H(T_2 - T_1)}{\rho} \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right) + \frac{\dot{Y}_1}{\left(\frac{\Gamma_1}{\alpha_1} + \frac{\Gamma_2}{\alpha_2} \right)} \left(\frac{\frac{\rho_1 c_1^2}{\alpha_1} + \frac{\rho_2 c_2^2}{\alpha_2}}{\rho_I} - \left(\frac{c_1^2}{\alpha_1} + \frac{c_2^2}{\alpha_2} \right) \right) \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right) \\ & - \frac{\dot{Y}_1}{\left(\frac{\Gamma_1}{\alpha_1} + \frac{\Gamma_2}{\alpha_2} \right)} \left(\frac{\Gamma_1}{\alpha_1 T_2} + \frac{\Gamma_2}{\alpha_2 T_1} \right) (h_1 - h_2) + (s_1 - s_2) \dot{Y}_1 \geq 0. \end{aligned}$$

La différence d'enthalpie peut être écrite comme une différence d'enthalpie libre

$$h_1 - h_2 = g_1 - g_2 + T_1 s_1 - T_2 s_2.$$

En arrangeant quelque peu la dernière inégalité, on obtient

$$\begin{aligned} & \frac{H(T_2 - T_1)^2}{\rho} + \frac{\frac{\Gamma_1 T_1}{\alpha_1} + \frac{\Gamma_2 T_2}{\alpha_2}}{\frac{\Gamma_1}{\alpha_1} + \frac{\Gamma_2}{\alpha_2}} (h_2 - h_1) \dot{Y}_1 + \\ & + \dot{Y}_1 \left\{ \frac{T_2 - T_1}{\frac{\Gamma_1}{\alpha_1} + \frac{\Gamma_2}{\alpha_2}} \left(\frac{\frac{\rho_1 c_1^2}{\alpha_1} + \frac{\rho_2 c_2^2}{\alpha_2}}{\rho_I} - \left(\frac{c_1^2}{\alpha_1} + \frac{c_2^2}{\alpha_2} \right) \right) + T_1 T_2 (s_1 - s_2) \right\} \geq 0. \end{aligned}$$

Introduisons à ce stade une température d'interface moyenne

$$T_I = \frac{\frac{\Gamma_1 T_1}{\alpha_1} + \frac{\Gamma_2 T_2}{\alpha_2}}{\frac{\Gamma_1}{\alpha_1} + \frac{\Gamma_2}{\alpha_2}}.$$

L'inégalité d'entropie devient

$$\begin{aligned} & \frac{H(T_2 - T_1)^2}{\rho} + \left((h_2 - h_1) + \frac{T_1 T_2}{T_I} (s_1 - s_2) \right) T_I \dot{Y}_1 + \\ & + \dot{Y}_1 \left\{ \frac{T_2 - T_1}{\frac{\Gamma_1}{\alpha_1} + \frac{\Gamma_2}{\alpha_2}} \left(\frac{\frac{\rho_1 c_1^2}{\alpha_1} + \frac{\rho_2 c_2^2}{\alpha_2}}{\rho_I} - \left(\frac{c_1^2}{\alpha_1} + \frac{c_2^2}{\alpha_2} \right) \right) \right\} \geq 0. \end{aligned}$$

Introduisons maintenant la température \bar{T} :

$$\bar{T} = \frac{T_1 T_2}{T_I}.$$

La condition précédente devient alors

$$\begin{aligned} & \frac{H(T_2 - T_1)^2}{\rho} + ((h_2 - \bar{T} s_2) - (h_1 - \bar{T} s_1)) T_I \dot{Y}_1 \\ & + \dot{Y}_1 \left\{ \frac{T_2 - T_1}{\left(\frac{\Gamma_1}{\alpha_1} + \frac{\Gamma_2}{\alpha_2} \right)} \left(\frac{\frac{\rho_1 c_1^2}{\alpha_1} + \frac{\rho_2 c_2^2}{\alpha_2}}{\rho_I} - \left(\frac{c_1^2}{\alpha_1} + \frac{c_2^2}{\alpha_2} \right) \right) \right\} \geq 0, \end{aligned}$$

ou encore, en introduisant les enthalpies libres

$$\begin{cases} \bar{g}_1 = h_1 - \bar{T} s_1, \\ \bar{g}_2 = h_2 - \bar{T} s_2, \end{cases}$$

on a

$$\begin{aligned} & \frac{H (T_2 - T_1)^2}{\rho} + (\bar{g}_2 - \bar{g}_1) T_I \dot{Y}_1 \\ & + \dot{Y}_1 \left\{ \frac{T_2 - T_1}{\left(\frac{\Gamma_1}{\alpha_1} + \frac{\Gamma_2}{\alpha_2}\right)} \left(\frac{\frac{\rho_1 c_1^2}{\alpha_1} + \frac{\rho_2 c_2^2}{\alpha_2}}{\rho_I} - \left(\frac{c_1^2}{\alpha_1} + \frac{c_2^2}{\alpha_2} \right) \right) \right\} \geq 0. \end{aligned}$$

Dans cette formule, le premier terme relatif aux échanges de chaleur assure une production d'entropie positive. Le deuxième terme en fera de même si on suppose le taux de transfert de masse comme proportionnel à l'écart des potentiels chimiques

$$\dot{Y}_1 = \beta (\bar{g}_2 (P, T_2, \bar{T}) - \bar{g}_1 (P, T_1, \bar{T})) ,$$

où β est un paramètre positif (ou une fonction) de relaxation qui contrôle la vitesse à laquelle l'équilibre des potentiels chimiques sera atteint. Ce paramètre contient en fait la cinétique de réaction du matériau.

Le troisième terme n'a pas a priori de signe puisque \dot{Y}_1 peut être positif ou négatif en fonction de l'ordre choisi pour numérotter les matériaux. Il en est de même pour l'écart de température.

Puisque les deux premiers termes assurent une production d'entropie positive, une façon d'obtenir la satisfaction de la seconde loi de la thermodynamique est que le troisième terme soit nul :

$$\frac{T_2 - T_1}{\left(\frac{\Gamma_1}{\alpha_1} + \frac{\Gamma_2}{\alpha_2}\right)} \left(\frac{\frac{\rho_1 c_1^2}{\alpha_1} + \frac{\rho_2 c_2^2}{\alpha_2}}{\rho_I} - \left(\frac{c_1^2}{\alpha_1} + \frac{c_2^2}{\alpha_2} \right) \right) = 0 .$$

Ceci donne une contrainte qui permet la détermination de la masse volumique ρ_I à l'interface

$$\rho_I = \frac{\frac{\rho_1 c_1^2}{\alpha_1} + \frac{\rho_2 c_2^2}{\alpha_2}}{\frac{c_1^2}{\alpha_1} + \frac{c_2^2}{\alpha_2}} .$$

Le modèle devient alors parfaitement symétrique

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \alpha_1}{\partial t} + \vec{u} \cdot \text{grad}(\alpha_1) = \\ \frac{\alpha_1 \alpha_2}{\alpha_2 \rho_1 c_1^2 + \alpha_1 \rho_2 c_2^2} \left[(\rho_2 c_2^2 - \rho_1 c_1^2) \text{div}(\vec{u}) + H(T_2 - T_1) \left(\frac{\Gamma_1}{\alpha_1} + \frac{\Gamma_2}{\alpha_2} \right) \right] \\ \quad + \rho \dot{Y}_1 \frac{\frac{c_1^2}{\alpha_1} + \frac{c_2^2}{\alpha_2}}{\frac{\rho_1 c_1^2}{\alpha_1} + \frac{\rho_2 c_2^2}{\alpha_2}}, \\ \frac{\partial (\alpha \rho)_1}{\partial t} + \text{div}((\alpha \rho)_1 \vec{u}) = \rho \dot{Y}_1, \\ \frac{\partial (\alpha \rho)_2}{\partial t} + \text{div}((\alpha \rho)_2 \vec{u}) = -\rho \dot{Y}_1, \\ \frac{\partial (\rho \vec{u})}{\partial t} + \text{div}(\rho \vec{u} \otimes \vec{u}) + \text{grad}(P) = 0, \\ \frac{\partial (\rho E)}{\partial t} + \text{div}(\vec{u} (\rho E + P)) = 0, \end{array} \right. \quad (18)$$

avec $\dot{Y}_1 = \beta (g_2 - g_1)$. Ce modèle assure

- une relaxation du système vers l'équilibre total,
- une production d'entropie positive,
- la symétrie dans le traitement des différents constituants.

Il nous faut maintenant l'étudier pour la résolution de problèmes de détonations.

3.2 Cas multiphasique 2-D en cartouche cylindrique suivant l'axe de symétrie : modèle de Wood et Kirkwood étendu.

3.2.1 Relations de choc et divergence de l'écoulement.

L'équation d'évolution sur la fraction volumique n'étant pas sous forme conservative, des relations de choc ont du être déterminées. Ceci a fait l'objet d'une étude spécifique [12] (Saurel et al. (2005)). Les relations correspondantes sont rappelées ci-après (ici σ est la vitesse du front de détonation, u et w sont les composantes de la vitesse du mélange dans le repère cylindrique)

$$\left\{ \begin{array}{l} [Y_p] = 0, \\ [w] = 0, \\ [\rho (u - \sigma)] = 0, \\ [\rho u (u - \sigma) + P] = 0, \\ e_k - e_k^0 + \frac{P + P_0}{2} (\nu_k - \nu_k^0) = 0. \end{array} \right. \quad (19)$$

Cette dernière relation, valide pour chaque phase, est en accord avec le saut d'énergie totale du système

$$[\rho E (u - \sigma) + P u] = 0.$$

Par ailleurs, l'équation du mouvement étant inchangée par rapport au cas monophasique, la divergence de l'écoulement $\hat{w}_0 = \left. \frac{\partial w}{\partial r} \right|_{r=0}$ garde l'expression établie précédemment

$$\hat{w}_0 = (\sigma - |\vec{u}_n| (x = 0)) / R .$$

3.2.2 Formulation en variables primitives

Le calcul de la zone de réaction ainsi que la détermination des conditions sur la surface sonique nécessite la formulation du système (18) en variables primitives. Après quelques transformations, le système exprimant la dynamique de l'écoulement suivant l'axe de la cartouche s'écrit

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d_u \alpha_1}{dt} = \frac{(\rho_2 c_2^2 - \rho_1 c_1^2) \left(\frac{\partial u}{\partial x} + 2 \hat{w}_0 \right) + H (T_2 - T_1) \left(\frac{\Gamma_1}{\alpha_1} + \frac{\Gamma_2}{\alpha_2} \right) + \rho \dot{Y}_1 \left(\frac{c_1^2}{\alpha_1} + \frac{c_2^2}{\alpha_2} \right)}{\frac{\rho_1 c_1^2}{\alpha_1} + \frac{\rho_2 c_2^2}{\alpha_2}} , \\ \frac{d_u Y_1}{dt} = \dot{Y}_1 , \\ \frac{d_u \rho}{dt} + \rho \frac{\partial u}{\partial x} = -2 \rho \hat{w}_0 , \\ \frac{d_u u}{dt} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x} = 0 , \\ \frac{d_u e}{dt} + \frac{P}{\rho} \frac{\partial u}{\partial x} = -2 \frac{P}{\rho} \hat{w}_0 . \end{array} \right.$$

Comme dans le cas monophasique, cette dernière équation peut aussi s'écrire

$$\frac{d_u e}{dt} + P \frac{d_u \nu}{dt} = 0 ,$$

où $\nu = 1/\rho$ désigne le volume spécifique du mélange.

Il s'agit maintenant de déterminer l'équation d'évolution de la pression. Pour cela, on utilise cette dernière équation, mise sous la forme

$$Y_1 \left(\frac{d_u e_1}{dt} + P \frac{d_u \nu_1}{dt} \right) + Y_2 \left(\frac{d_u e_2}{dt} + P \frac{d_u \nu_2}{dt} \right) + (h_1 - h_2) \dot{Y}_1 = 0 .$$

Les lois d'état de chaque phase k relient les énergies internes à la masse volumique et la pression

$$e_k = e_k (P, \rho_k) .$$

L'équation d'énergie devient alors

$$Y_1 \left(\left. \frac{\partial e_1}{\partial P} \right|_{\rho_1} \frac{d_u P}{dt} + \left(\left. \frac{\partial e_1}{\partial \rho_1} \right|_P - \frac{P}{\rho_1^2} \right) \frac{d_u \rho_1}{dt} \right) + Y_2 \left(\left. \frac{\partial e_2}{\partial P} \right|_{\rho_2} \frac{d_u P}{dt} + \left(\left. \frac{\partial e_2}{\partial \rho_2} \right|_P - \frac{P}{\rho_2^2} \right) \frac{d_u \rho_2}{dt} \right) + (h_1 - h_2) \dot{Y}_1 = 0 .$$

En utilisant les définitions des vitesses du son au carré pour chaque phase k

$$c_k^2 = \frac{\left. \frac{P}{\rho_k^2} - \frac{\partial e_k}{\partial \rho_k} \right|_P}{\left. \frac{\partial e_k}{\partial P} \right|_{\rho_k}} ,$$

et des coefficients de Grüneisen Γ_k

$$\frac{1}{\rho_k \Gamma_k} = \left. \frac{\partial e_k}{\partial P} \right|_{\rho_k},$$

l'équation d'énergie se simplifie comme suit

$$\frac{Y_1}{\rho_1 \Gamma_1} \left(\frac{d_u P}{dt} - c_1^2 \frac{d_u \rho_1}{dt} \right) + \frac{Y_2}{\rho_2 \Gamma_2} \left(\frac{d_u P}{dt} - c_2^2 \frac{d_u \rho_2}{dt} \right) + (h_1 - h_2) \dot{Y}_1 = 0,$$

c'est à dire

$$\left(\frac{\alpha_1}{\Gamma_1} + \frac{\alpha_2}{\Gamma_2} \right) \frac{d_u P}{dt} - \frac{\alpha_1 c_1^2}{\Gamma_1} \frac{d_u \rho_1}{dt} - \frac{\alpha_2 c_2^2}{\Gamma_2} \frac{d_u \rho_2}{dt} + \rho (h_1 - h_2) \dot{Y}_1 = 0.$$

On peut maintenant exprimer les variations de densité à l'aide des équations de masse

$$\begin{cases} \frac{d_u \rho_1}{dt} = -\frac{\rho_1}{\alpha_1} \frac{d_u \alpha_1}{dt} - \rho_1 \operatorname{div}(\vec{u}) + \frac{\rho \dot{Y}_1}{\alpha_1}, \\ \frac{d_u \rho_2}{dt} = \frac{\rho_2}{\alpha_2} \frac{d_u \alpha_1}{dt} - \rho_2 \operatorname{div}(\vec{u}) - \frac{\rho \dot{Y}_1}{\alpha_2}. \end{cases}$$

L'équation d'énergie devient alors

$$\begin{aligned} \left(\frac{\alpha_1}{\Gamma_1} + \frac{\alpha_2}{\Gamma_2} \right) \frac{d_u P}{dt} + \left(\frac{\rho_1 c_1^2}{\Gamma_1} - \frac{\rho_2 c_2^2}{\Gamma_2} \right) \frac{d_u \alpha_1}{dt} + \left(\frac{\alpha_1 \rho_1 c_1^2}{\Gamma_1} + \frac{\alpha_2 \rho_2 c_2^2}{\Gamma_2} \right) \operatorname{div}(\vec{u}) + \\ + \left(h_1 - \frac{c_1^2}{\Gamma_1} \right) - \left(h_2 - \frac{c_2^2}{\Gamma_2} \right) \rho \dot{Y}_1 = 0. \end{aligned}$$

On utilise alors l'équation d'évolution de la fraction volumique

$$\frac{d_u \alpha_1}{dt} = \frac{(\rho_2 c_2^2 - \rho_1 c_1^2) \operatorname{div}(\vec{u}) + H(T_2 - T_1) \left(\frac{\Gamma_1}{\alpha_1} + \frac{\Gamma_2}{\alpha_2} \right) + \rho \dot{Y}_1 \left(\frac{c_1^2}{\alpha_1} + \frac{c_2^2}{\alpha_2} \right)}{\frac{\rho_1 c_1^2}{\alpha_1} + \frac{\rho_2 c_2^2}{\alpha_2}},$$

et l'équation en pression devient

$$\begin{aligned} \left(\frac{\alpha_1}{\Gamma_1} + \frac{\alpha_2}{\Gamma_2} \right) \frac{d_u P}{dt} + \\ + \left(\frac{\rho_2 c_2^2 - \rho_1 c_1^2}{\frac{\rho_1 c_1^2}{\alpha_1} + \frac{\rho_2 c_2^2}{\alpha_2}} + \frac{\frac{\alpha_1 \rho_1 c_1^2}{\Gamma_1} + \frac{\alpha_2 \rho_2 c_2^2}{\Gamma_2}}{\frac{\rho_1 c_1^2}{\alpha_1} - \frac{\rho_2 c_2^2}{\Gamma_2}} \right) \left(\frac{\rho_1 c_1^2}{\Gamma_1} - \frac{\rho_2 c_2^2}{\Gamma_2} \right) \operatorname{div}(\vec{u}) + \\ + \frac{\frac{\Gamma_1}{\alpha_1} + \frac{\Gamma_2}{\alpha_2}}{\frac{\rho_1 c_1^2}{\alpha_1} + \frac{\rho_2 c_2^2}{\alpha_2}} \left(\frac{\rho_1 c_1^2}{\Gamma_1} - \frac{\rho_2 c_2^2}{\Gamma_2} \right) H(T_2 - T_1) + \\ + \left(\left(\frac{\rho_1 c_1^2}{\Gamma_1} - \frac{\rho_2 c_2^2}{\Gamma_2} \right) \frac{\frac{c_1^2}{\alpha_1} + \frac{c_2^2}{\alpha_2}}{\frac{\rho_1 c_1^2}{\alpha_1} + \frac{\rho_2 c_2^2}{\alpha_2}} + \left(h_1 - \frac{c_1^2}{\Gamma_1} \right) - \left(h_2 - \frac{c_2^2}{\Gamma_2} \right) \right) \rho \dot{Y}_1 = 0. \end{aligned}$$

Des simplifications apparaissent

$$\begin{aligned} & \frac{d_u P}{dt} + \rho c^2 \operatorname{div}(\vec{u}) + \frac{\left(\frac{\Gamma_1}{\alpha_1} + \frac{\Gamma_2}{\alpha_2}\right) \left(\frac{\rho_1 c_1^2}{\Gamma_1} - \frac{\rho_2 c_2^2}{\Gamma_2}\right)}{\left(\frac{\rho_1 c_1^2}{\alpha_1} + \frac{\rho_2 c_2^2}{\alpha_2}\right) \left(\frac{\alpha_1}{\Gamma_1} + \frac{\alpha_2}{\Gamma_2}\right)} H(T_2 - T_1) + \\ & + \left[\left(\frac{\rho_1 c_1^2}{\Gamma_1} - \frac{\rho_2 c_2^2}{\Gamma_2}\right) \frac{c_1^2 + c_2^2}{\frac{\rho_1 c_1^2}{\alpha_1} + \frac{\rho_2 c_2^2}{\alpha_2}} + \left(h_1 - \frac{c_1^2}{\Gamma_1}\right) - \left(h_2 - \frac{c_2^2}{\Gamma_2}\right) \right] \frac{\rho \dot{Y}_1}{\frac{\alpha_1}{\Gamma_1} + \frac{\alpha_2}{\Gamma_2}} = 0, \end{aligned}$$

avec

$$\frac{1}{\rho c^2} = \frac{\alpha_1}{\rho_1 c_1^2} + \frac{\alpha_2}{\rho_2 c_2^2},$$

que l'on peut encore simplifier légèrement sous la forme suivante

$$\begin{aligned} & \frac{d_u P}{dt} + \rho c^2 \operatorname{div}(\vec{u}) = \frac{\Gamma_1 \Gamma_2}{\alpha_1 \alpha_2} \frac{\frac{\rho_2 c_2^2}{\Gamma_2} - \frac{\rho_1 c_1^2}{\Gamma_1}}{\frac{\rho_1 c_1^2}{\alpha_1} + \frac{\rho_2 c_2^2}{\alpha_2}} H(T_2 - T_1) + \\ & + \left(\frac{\frac{\rho_2 c_2^2}{\Gamma_2} - \frac{\rho_1 c_1^2}{\Gamma_1}}{\frac{\rho_1 c_1^2}{\alpha_1} + \frac{\rho_2 c_2^2}{\alpha_2}} \left(\frac{c_1^2}{\alpha_1} + \frac{c_2^2}{\alpha_2} \right) + \left(h_2 - \frac{c_2^2}{\Gamma_2} \right) - \left(h_1 - \frac{c_1^2}{\Gamma_1} \right) \right) \frac{\rho \dot{Y}_1}{\frac{\alpha_1}{\Gamma_1} + \frac{\alpha_2}{\Gamma_2}}, \end{aligned} \quad (20)$$

ou présenter sous une forme qui prévient les singularités dans la limite monophasique

$$\begin{aligned} & \frac{d_u P}{dt} + \rho c^2 \operatorname{div}(\vec{u}) = \frac{\Gamma_1 \rho_2 c_2^2 - \Gamma_2 \rho_1 c_1^2}{\alpha_2 \rho_1 c_1^2 + \alpha_1 \rho_2 c_2^2} H(T_2 - T_1) + \\ & + \left[\frac{\alpha_2 c_1^2 + \alpha_1 c_2^2}{\alpha_1 \Gamma_2 + \Gamma_1 \alpha_2} \frac{\Gamma_1 \rho_2 c_2^2 - \Gamma_2 \rho_1 c_1^2}{\alpha_2 \rho_1 c_1^2 + \alpha_1 \rho_2 c_2^2} + \frac{\Gamma_1 \Gamma_2}{\alpha_1 \Gamma_2 + \Gamma_1 \alpha_2} \left(\left(h_2 - \frac{c_2^2}{\Gamma_2} \right) - \left(h_1 - \frac{c_1^2}{\Gamma_1} \right) \right) \right] \rho \dot{Y}_1. \end{aligned}$$

Le système d'équations en variables primitives qui traduit la dynamique de l'écoulement suivant l'axe de la cartouche cylindrique s'écrit alors

$$\left\{ \begin{aligned} & \frac{d_u \alpha_1}{dt} = \frac{(\rho_2 c_2^2 - \rho_1 c_1^2) \left(\frac{\partial u}{\partial x} + 2 \hat{w}_0 \right) + H(T_2 - T_1) \left(\frac{\Gamma_1}{\alpha_1} + \frac{\Gamma_2}{\alpha_2} \right) + \rho \dot{Y}_1 \left(\frac{c_1^2}{\alpha_1} + \frac{c_2^2}{\alpha_2} \right)}{\frac{\rho_1 c_1^2}{\alpha_1} + \frac{\rho_2 c_2^2}{\alpha_2}}, \\ & \frac{d_u Y_1}{dt} = \dot{Y}_1, \\ & \frac{d_u \rho}{dt} + \rho \frac{\partial u}{\partial x} = -2 \rho \hat{w}_0, \\ & \frac{d_u u}{dt} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x} = 0, \\ & \frac{d_u P}{dt} + \rho c^2 \frac{\partial u}{\partial x} = -2 \rho c^2 \hat{w}_0 + \frac{\Gamma_1 \rho_2 c_2^2 - \Gamma_2 \rho_1 c_1^2}{\alpha_2 \rho_1 c_1^2 + \alpha_1 \rho_2 c_2^2} H(T_2 - T_1) + \\ & + \left[\frac{\alpha_2 c_1^2 + \alpha_1 c_2^2}{\alpha_1 \Gamma_2 + \Gamma_1 \alpha_2} \frac{\Gamma_1 \rho_2 c_2^2 - \Gamma_2 \rho_1 c_1^2}{\alpha_2 \rho_1 c_1^2 + \alpha_1 \rho_2 c_2^2} + \frac{\Gamma_1 \Gamma_2}{\alpha_1 \Gamma_2 + \Gamma_1 \alpha_2} \left(\left(h_2 - \frac{c_2^2}{\Gamma_2} \right) - \left(h_1 - \frac{c_1^2}{\Gamma_1} \right) \right) \right] \rho \dot{Y}_1. \end{aligned} \right.$$

3.2.3 Conditions sur la surface sonique

Ces équations sont invariantes par translation Galiléenne. Ainsi, dans le repère du choc elles s'écrivent

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d_{\bar{u}} \alpha_1}{dt} = \frac{(\rho_2 c_2^2 - \rho_1 c_1^2) \left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial x} + 2 \hat{w}_0 \right) + H (T_2 - T_1) \left(\frac{\Gamma_1}{\alpha_1} + \frac{\Gamma_2}{\alpha_2} \right) + \rho \dot{Y}_1 \left(\frac{c_1^2}{\alpha_1} + \frac{c_2^2}{\alpha_2} \right)}{\frac{\rho_1 c_1^2}{\alpha_1} + \frac{\rho_2 c_2^2}{\alpha_2}}, \\ \frac{d_{\bar{u}} Y_1}{dt} = \dot{Y}_1, \\ \frac{d_{\bar{u}} \rho}{dt} + \rho \frac{\partial \bar{u}}{\partial x} = -2 \rho \hat{w}_0, \\ \frac{d_{\bar{u}} \bar{u}}{dt} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x} = 0, \\ \frac{d_{\bar{u}} P}{dt} + \rho c^2 \frac{\partial \bar{u}}{\partial x} = -2 \rho c^2 \hat{w}_0 + \frac{\Gamma_1 \rho_2 c_2^2 - \Gamma_2 \rho_1 c_1^2}{\alpha_2 \rho_1 c_1^2 + \alpha_1 \rho_2 c_2^2} H (T_2 - T_1) + \\ + \left[\frac{\alpha_2 c_1^2 + \alpha_1 c_2^2}{\alpha_1 \Gamma_2 + \Gamma_1 \alpha_2} \frac{\Gamma_1 \rho_2 c_2^2 - \Gamma_2 \rho_1 c_1^2}{\alpha_2 \rho_1 c_1^2 + \alpha_1 \rho_2 c_2^2} + \frac{\Gamma_1 \Gamma_2}{\alpha_1 \Gamma_2 + \Gamma_1 \alpha_2} \left(\left(h_2 - \frac{c_2^2}{\Gamma_2} \right) - \left(h_1 - \frac{c_1^2}{\Gamma_1} \right) \right) \right] \rho \dot{Y}_1, \end{array} \right.$$

avec $\bar{u} = \sigma - u$.

En considérant l'onde stationnaire pour l'écoulement attaché à son repère, ce système se transforme en le système d'équations différentielles suivant

$$\left\{ \begin{array}{l} \bar{u} \frac{d \alpha_1}{dx} = \frac{(\rho_2 c_2^2 - \rho_1 c_1^2) \left(\frac{d \bar{u}}{dx} + 2 \hat{w}_0 \right) + H (T_2 - T_1) \left(\frac{\Gamma_1}{\alpha_1} + \frac{\Gamma_2}{\alpha_2} \right) + \rho \dot{Y}_1 \left(\frac{c_1^2}{\alpha_1} + \frac{c_2^2}{\alpha_2} \right)}{\frac{\rho_1 c_1^2}{\alpha_1} + \frac{\rho_2 c_2^2}{\alpha_2}}, \\ \bar{u} \frac{d Y_1}{dx} = \dot{Y}_1, \\ \bar{u} \frac{d \rho}{dx} + \rho \frac{d \bar{u}}{dx} = -2 \rho \hat{w}_0, \\ \bar{u} \frac{d \bar{u}}{dx} + \frac{1}{\rho} \frac{d P}{dx} = 0 \\ \bar{u} \frac{d P}{dx} + \rho c^2 \frac{d \bar{u}}{dx} = -2 \rho c^2 \hat{w}_0 + \frac{\Gamma_1 \rho_2 c_2^2 - \Gamma_2 \rho_1 c_1^2}{\alpha_2 \rho_1 c_1^2 + \alpha_1 \rho_2 c_2^2} H (T_2 - T_1) + \\ + \left[\frac{\alpha_2 c_1^2 + \alpha_1 c_2^2}{\alpha_1 \Gamma_2 + \Gamma_1 \alpha_2} \frac{\Gamma_1 \rho_2 c_2^2 - \Gamma_2 \rho_1 c_1^2}{\alpha_2 \rho_1 c_1^2 + \alpha_1 \rho_2 c_2^2} + \frac{\Gamma_1 \Gamma_2}{\alpha_1 \Gamma_2 + \Gamma_1 \alpha_2} \left(\left(h_2 - \frac{c_2^2}{\Gamma_2} \right) - \left(h_1 - \frac{c_1^2}{\Gamma_1} \right) \right) \right] \rho \dot{Y}_1. \end{array} \right.$$

En combinant les deux dernières équations on obtient

$$\begin{aligned} \rho \left(c^2 - \bar{u}^2 \right) \frac{d \bar{u}}{dx} &= -2 \rho c^2 \hat{w}_0 + \frac{\Gamma_1 \rho_2 c_2^2 - \Gamma_2 \rho_1 c_1^2}{\alpha_2 \rho_1 c_1^2 + \alpha_1 \rho_2 c_2^2} H (T_2 - T_1) + \\ &+ \left[\frac{\alpha_2 c_1^2 + \alpha_1 c_2^2}{\alpha_1 \Gamma_2 + \Gamma_1 \alpha_2} \frac{\Gamma_1 \rho_2 c_2^2 - \Gamma_2 \rho_1 c_1^2}{\alpha_2 \rho_1 c_1^2 + \alpha_1 \rho_2 c_2^2} + \frac{\Gamma_1 \Gamma_2}{\alpha_1 \Gamma_2 + \Gamma_1 \alpha_2} \left(\left(h_2 - \frac{c_2^2}{\Gamma_2} \right) - \left(h_1 - \frac{c_1^2}{\Gamma_1} \right) \right) \right] \rho \dot{Y}_1. \end{aligned}$$

On peut finalement présenter le système différentiel précédent sous la forme suivante

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho \left(c^2 - \bar{u}^2 \right) \frac{d\bar{u}}{dx} = -2 \rho c^2 \hat{w}_0 + \frac{\Gamma_1 \rho_2 c_2^2 - \Gamma_2 \rho_1 c_1^2}{\alpha_2 \rho_1 c_1^2 + \alpha_1 \rho_2 c_2^2} H (T_2 - T_1) + \rho \dot{Y}_1 \times \\ \left[\frac{\alpha_2 c_1^2 + \alpha_1 c_2^2}{\alpha_1 \Gamma_2 + \Gamma_1 \alpha_2} \frac{\Gamma_1 \rho_2 c_2^2 - \Gamma_2 \rho_1 c_1^2}{\alpha_2 \rho_1 c_1^2 + \alpha_1 \rho_2 c_2^2} + \frac{\Gamma_1 \Gamma_2}{\alpha_1 \Gamma_2 + \Gamma_1 \alpha_2} \left(\left(h_2 - \frac{c_2^2}{\Gamma_2} \right) - \left(h_1 - \frac{c_1^2}{\Gamma_1} \right) \right) \right], \\ \frac{d\rho}{dx} = -\frac{\rho}{\bar{u}} \left(\frac{d\bar{u}}{dx} + 2 \hat{w}_0 \right), \\ \frac{dP}{dx} = -\rho \bar{u} \frac{d\bar{u}}{dx}, \\ \frac{dY_1}{dx} = \frac{\dot{Y}_1}{\bar{u}}, \\ \frac{d\alpha_1}{dx} = \frac{(\rho_2 c_2^2 - \rho_1 c_1^2) \left(\frac{d\bar{u}}{dx} + 2 \hat{w}_0 \right) + H (T_2 - T_1) \left(\frac{\Gamma_1}{\alpha_1} + \frac{\Gamma_2}{\alpha_2} \right) + \rho \dot{Y}_1 \left(\frac{c_1^2}{\alpha_1} + \frac{c_2^2}{\alpha_2} \right)}{\bar{u} \left(\frac{\rho_1 c_1^2}{\alpha_1} + \frac{\rho_2 c_2^2}{\alpha_2} \right)}. \end{array} \right. \quad (21)$$

Les conditions sur la surface sonique se déduisent directement de la première équation

$$\begin{aligned} & -2 \rho c^2 \hat{w}_0 + \frac{\Gamma_1 \rho_2 c_2^2 - \Gamma_2 \rho_1 c_1^2}{\alpha_2 \rho_1 c_1^2 + \alpha_1 \rho_2 c_2^2} H (T_2 - T_1) + \rho \dot{Y}_1 \times \\ & \left[\frac{\alpha_2 c_1^2 + \alpha_1 c_2^2}{\alpha_1 \Gamma_2 + \Gamma_1 \alpha_2} \frac{\Gamma_1 \rho_2 c_2^2 - \Gamma_2 \rho_1 c_1^2}{\alpha_2 \rho_1 c_1^2 + \alpha_1 \rho_2 c_2^2} + \frac{\Gamma_1 \Gamma_2}{\alpha_1 \Gamma_2 + \Gamma_1 \alpha_2} \left(\left(h_2 - \frac{c_2^2}{\Gamma_2} \right) - \left(h_1 - \frac{c_1^2}{\Gamma_1} \right) \right) \right] = 0, \end{aligned} \quad (22)$$

lorsque

$$c^2 = \bar{u}^2.$$

4 Analyse du modèle

La condition (22) qui vient d'être obtenue mérite quelques remarques et analyses complémentaires.

Considérons plusieurs cas limites :

1. une des limites consiste à considérer que l'écoulement est unidimensionnel, sans aucun effet de courbure ($\hat{w}_0 = 0$) ;
2. une autre limite consiste à considérer que les échanges de chaleur sont très rapides devant la décomposition chimique. Dans ce cas, les écarts de températures sont absents et le modèle devient isotherme;
3. une situation limite peut se rajouter à la précédente lorsque les deux fluides sont régis par la même loi d'état, avec les mêmes paramètres. Dans ce cas, toutes les propriétés thermodynamiques des deux fluides sont confondues.

Ceci conduit à plusieurs combinaisons possibles de modèles limites, que nous examinons ci-après.

4.1 Écoulement plan

4.1.1 Écoulement plan hors d'équilibre thermique

La condition (22) devient

$$\frac{\Gamma_1 \rho_2 c_2^2 - \Gamma_2 \rho_1 c_1^2}{\alpha_2 \rho_1 c_1^2 + \alpha_1 \rho_2 c_2^2} H (T_2 - T_1) + \rho \dot{Y}_1 \times \left[\frac{\alpha_2 c_1^2 + \alpha_1 c_2^2}{\alpha_1 \Gamma_2 + \alpha_2 \Gamma_1} \frac{\Gamma_1 \rho_2 c_2^2 - \Gamma_2 \rho_1 c_1^2}{\alpha_2 \rho_1 c_1^2 + \alpha_1 \rho_2 c_2^2} + \frac{\Gamma_1 \Gamma_2}{\alpha_1 \Gamma_2 + \alpha_2 \Gamma_1} \left(\left(h_2 - \frac{c_2^2}{\Gamma_2} \right) - \left(h_1 - \frac{c_1^2}{\Gamma_1} \right) \right) \right] = 0 ,$$

lorsque

$$c^2 = \bar{u}^2 .$$

Cette condition est en contradiction avec la condition de Chapman Jouguet; elle affirme que pour un écoulement plan, la réaction n'est pas nécessairement terminée au point sonique et que l'équilibre thermodynamique n'est pas atteint : l'apport exothermique des réactions peut en effet être absorbé par les échanges de chaleur.

Une situation analogue avait été prédite par Neumann [10] pour des systèmes chimiques gazeux composés de réactions exothermiques et d'autres réactions endothermiques. Les détonations correspondantes avaient alors été qualifiée de *pathologiques* [6].

Pour nos applications, cette remarque peut avoir de l'importance : des réactions retardées se produiront en dehors du plan sonique, même dans le cas unidimensionnel plan, et pourront donc avoir des effets propulsifs intéressants.

4.1.2 Écoulement plan en équilibre thermique

Ajoutons à la situation précédente l'hypothèse 2. La condition de stabilité (22) de la détonation devient

$$\dot{Y}_1 = 0 ,$$

lorsque

$$c^2 = \bar{u}^2 .$$

La condition classique de Chapman Jouguet est alors retrouvée.

L'ajout de l'hypothèse 3 n'apportera rien de plus. Ces conclusions ne s'appliquent plus exactement lorsque les effets de divergence de l'écoulement sont à considérer.

4.2 Écoulement faiblement divergent

4.2.1 Écoulement faiblement divergent hors équilibre thermique

La condition (22) s'applique alors et montre que sur la surface sonique, les effets hors équilibre thermique et les effets de divergence de l'écoulement viennent compenser les apports exothermiques de la réaction. C'est le cas qui sera vraisemblablement le plus fréquent pour nos applications.

4.2.2 Écoulement faiblement divergent en équilibre thermique

Les conditions sur la surface sonique sont alors

$$-2 \rho c^2 \hat{w}_0 + \rho \dot{Y}_1 \times \left[\frac{\alpha_2 c_1^2 + \alpha_1 c_2^2}{\alpha_1 \Gamma_2 + \alpha_2 \Gamma_1} \frac{\Gamma_1 \rho_2 c_2^2 - \Gamma_2 \rho_1 c_1^2}{\alpha_2 \rho_1 c_1^2 + \alpha_1 \rho_2 c_2^2} + \frac{\Gamma_1 \Gamma_2}{\alpha_1 \Gamma_2 + \alpha_2 \Gamma_1} \left((h_2 - \frac{c_2^2}{\Gamma_2}) - (h_1 - \frac{c_1^2}{\Gamma_1}) \right) \right] = 0 ,$$

lorsque

$$c^2 = \bar{u}^2 .$$

Cette condition montre que même lorsque l'équilibre thermique est atteint, les différences de comportement thermodynamique des différents constituants viennent modifier sensiblement la condition bien connue de Wood et Kirkwood. Pour retrouver cette condition, il faut utiliser l'hypothèse supplémentaire 3. de la section 4.

4.2.3 Écoulement faiblement divergent en équilibre thermique pour des fluides de même comportement thermodynamique

Une telle situation pourrait se produire si les deux fluides, réactif et produit, étaient régis par la même équation d'état avec les mêmes paramètres. Ceci peut se concevoir pour les gaz, si les deux constituants ont le même rapport des chaleurs spécifiques, ou si l'équation d'état est vue comme une équation d'état isobare-isotherme. La condition sur la surface sonique devient alors

$$-2 \rho c^2 \hat{w}_0 + \Gamma (h_2 - h_1) \rho \dot{Y}_1 = 0 ,$$

lorsque

$$c^2 = \bar{u}^2 .$$

Afin de retrouver la condition de Wood et Kirkwood obtenue dans la section 2.2, utilisons de nouveau la définition du coefficient de Grüneisen

$$\left. \frac{\partial P}{\partial e} \right|_{\rho} = \rho \Gamma ,$$

et développons la différence d'enthalpie

$$h_2 - h_1 = e_2 + \frac{P}{\rho_2} - e_1 - \frac{P}{\rho_1} .$$

Puisque les fluides ont le même comportement thermodynamique, cette différence se réduit à

$$h_2 - h_1 = e_2 - e_1 .$$

En utilisant les définitions des énergies internes, on obtient

$$\begin{aligned} h_2 - h_1 &= e_2 - e_1 , \\ &= \mathcal{E}_2(P, \rho_2) + e_2^0 - \mathcal{E}_1(P, \rho_1) - e_1^0 , \\ &= e_2^0 - e_1^0 , \\ &= q . \end{aligned}$$

On retrouve alors la condition établie dans la section 2.2, à savoir

$$q \dot{Y}_p \left. \frac{\partial P}{\partial e} \right|_{\rho, Y_k} - 2 \rho c^2 \hat{w}_0 = 0 ,$$

lorsque

$$c^2 = \bar{u}^2 .$$

5 Résolution numérique

La résolution numérique du système (21), accompagnée des conditions (22) sur la frontière sonique, et des conditions (19) au choc est plutôt délicate. C'est pourquoi nous avons opté pour une mise au point graduelle de l'outil de résolution, en commençant par le modèle ZND, puis le modèle WK (monophasique), et enfin le modèle diphasique. C'est ce qui va être décrit ci-après.

5.1 Résolution du modèle ZND

Ce modèle a été obtenu précédemment. Il comprend

1. les relations de choc

$$\begin{cases} [Y_p] = 0 , \\ [\rho (u - D)] = 0 , \\ [\rho u (u - D) + P] = 0 , \\ [\rho E (u - D) + P u] = 0 ; \end{cases}$$

2. les équations de l'écoulement (5) entre le front de choc et la frontière sonique

$$\begin{cases} \rho (c^2 - \bar{u}^2) \frac{d\bar{u}}{dx} = q \dot{Y}_p \left. \frac{\partial P}{\partial e} \right|_{\rho, Y_k} , \\ \frac{d\rho}{dx} = -\frac{\rho}{\bar{u}} \frac{d\bar{u}}{dx} , \\ \frac{dP}{dx} = -\rho \bar{u} \frac{d\bar{u}}{dx} , \\ \frac{dY_p}{dx} = \frac{\dot{Y}_p}{\bar{u}} ; \end{cases}$$

3. la condition CJ sur la frontière sonique

$$\dot{Y}_p = 0 , \text{ lorsque } c^2 = \bar{u}^2 .$$

À l'approche du point sonique, lors de la résolution numérique, la première équation du système (5) va présenter une singularité. Cette difficulté peut être contournée en effectuant un changement de variables. On pose

$$\frac{dx}{d\tau} = \frac{c - \bar{u}}{c} .$$

On peut alors écrire

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} &= \frac{d}{d\tau} \frac{d\tau}{dx}, \\ &= \frac{d}{d\tau} \frac{c}{c - \bar{u}}. \end{aligned}$$

Le système différentiel (5) devient alors

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dx}{d\tau} = \frac{c - \bar{u}}{c}, \\ \frac{d\bar{u}}{d\tau} = \frac{q \dot{Y}_p \left. \frac{\partial P}{\partial e} \right|_{\rho, Y_k}}{\rho c (c + \bar{u})}, \\ \frac{d\rho \bar{u}}{d\tau} = 0, \\ \frac{dP}{d\tau} = -\rho \bar{u} x \frac{d\bar{u}}{d\tau}, \\ \frac{dY_p}{d\tau} = \frac{\dot{Y}_p}{\bar{u}} \frac{c - \bar{u}}{c}. \end{array} \right. \quad (23)$$

Il contient ainsi une équation supplémentaire, mais aucune division par zéro ne peut subvenir.

L'algorithme de résolution suit la séquence suivante

- a) on se donne un intervalle de pression $[P_{\text{inf}}, P_{\text{sup}}]$ dans lequel la pression au choc P^* est supposée appartenir. Cette pression de choc doit satisfaire à l'ensemble des équations (5), les conditions soniques et les conditions de choc;
- b) on fixe arbitrairement une pression P^* dans cet intervalle; par exemple

$$P^* = \frac{P_{\text{inf}} + P_{\text{sup}}}{2};$$

- c) on calcule l'état derrière le choc : ρ^* et \bar{u}^* , masse volumique et vitesse dans le repère de l'onde du milieu choqué. Les conditions initiales du système (23) sont alors déterminées;
- d) on calcule les termes sources de ce système;
- e) on calcule les pas de pseudo-temps assurant la positivité de la solution.

En effet, durant l'intégration, la fraction massique des produits doit rester inférieure à 1 dans la zone de réaction et atteindre finalement 1 au point sonique. Ainsi, $Y_p \leq 1$.

Dans le cadre d'une méthode d'intégration d'ordre 1, la fraction massique va évoluer suivant l'algorithme (itération $j = 1, 2, \dots$, $\tau^0 = x^0 = 0$, $\Delta\tau^{j+1} = \tau^{j+1} - \tau^j$, $z^{j+1} = z(\tau^{j+1})$ pour toute variable $z = x, \tau, Y_p, \dot{Y}_p, \rho, \bar{u}, c, \dots$):

$$Y_p^{j+1} = Y_p^j + \Delta\tau^{j+1} \frac{\dot{Y}_p^j}{\bar{u}^j} \frac{c^j - \bar{u}^j}{c^j}.$$

L'inégalité précédente devient alors

$$Y_p^j + \Delta\tau^{j+1} \frac{\dot{Y}_p^j}{\bar{u}^j} \frac{c^j - \bar{u}^j}{c^j} \leq 1.$$

Ceci donne un critère sur le pas d'intégration

$$\Delta\tau^{j+1} \leq \frac{1 - Y_p^j}{\frac{\dot{Y}_p^j}{\bar{u}^j} \frac{c^j - \bar{u}^j}{c^j}} = \Delta\tau_{Y_p}^{j+1} .$$

De la même façon, en tout point de l'écoulement, la vitesse matérielle doit rester inférieure à la vitesse du son

$$\bar{u}^j \leq c^j .$$

Pour une méthode d'intégration d'ordre 1, la vitesse va donc évoluer suivant le schéma

$$\bar{u}^{j+1} = \bar{u}^j + \Delta\tau^{j+1} \frac{q \dot{Y}_p^j \left. \frac{\partial P}{\partial e} \right|_{\rho, Y_k}^j}{\rho^j c^j (c^j + \bar{u}^j)} .$$

L'inégalité précédente devient alors

$$\bar{u}^j + \Delta\tau^{j+1} \frac{q \dot{Y}_p^j \left. \frac{\partial P}{\partial e} \right|_{\rho, Y_k}^j}{\rho^j c^j (c^j + \bar{u}^j)} \leq c^j .$$

Ceci donne un second critère sur le pas d'intégration

$$\Delta\tau^{j+1} \leq \frac{\rho^j c^j ((c^j)^2 - (\bar{u}^j)^2)}{q \dot{Y}_p^j \left. \frac{\partial P}{\partial e} \right|_{\rho, Y_k}^j} = \Delta\tau_{\bar{u}}^{j+1} .$$

Afin que le pas de temps global satisfasse les deux critères précédents, il faut donc que

$$\Delta\tau^{j+1} \leq \min \left(\Delta\tau_{Y_p}^{j+1}, \Delta\tau_{\bar{u}}^{j+1} \right) .$$

La satisfaction de ce critère assure que la solution ne produira jamais de Mach négatif ou strictement supérieur à 1, ou de fractions massiques négatives ou strictement supérieures à 1. Ainsi, la recherche de la vitesse de la détonation stable se fera pour un jeu de variables admissibles.

Enfin, le pas de pseudo temps choisi doit être tel que la précision de la solution soit garantie. Pour cela, il faut qu'un nombre suffisant de points d'intégration soit utilisé dans la zone de réaction. En effectuant le choix suivant

$$\Delta\tau^{j+1} = \text{CFL} \min \left(\Delta\tau_{Y_p}^{j+1}, \Delta\tau_{\bar{u}}^{j+1} \right) ,$$

avec $\text{CFL} = 10^{-3}$ par exemple, on est assuré qu'environ 1 000 points d'intégration seront utilisés dans la zone de réaction;

- f) on fait alors progresser la solution sur un pas de temps. Pour ce faire, on construit le vecteur des inconnues et le vecteur des termes sources

$$W^j = \left(x^j, \bar{u}^j, \rho^j \bar{u}^j, P^j, Y_p^j \right)^T ,$$

et

$$\dot{W}^j = \begin{pmatrix} \frac{c^j - \bar{u}^j}{c^j} \\ \frac{q \dot{Y}_p^j \frac{\partial P^j}{\partial e} \Big|_{\rho, Y_k}}{\rho^j c (c^j + \bar{u}^j)} \\ 0 \\ -\rho^j \bar{u}^j \frac{q \dot{Y}_p^j \frac{\partial P^j}{\partial e} \Big|_{\rho, Y_k}}{\rho^j c^j (c^j + \bar{u}^j)} \\ \frac{\dot{Y}_p^j}{\bar{u}^j} \frac{c^j - \bar{u}^j}{c^j} \end{pmatrix}.$$

La solution évolue alors suivant le schéma

$$W^{j+1} = W^j + \Delta\tau^{j+1} \dot{W}^j ;$$

- g) on effectue alors une série de tests pour déterminer la pression P^* correspondant à la détonation stable, c'est à dire celle qui vérifie à la fois les conditions de choc et les conditions de sonicité. Cette recherche est effectuée ainsi : pour ε donné, *aussi petit qu'on veut* :

Si $\frac{c^j - \bar{u}^j}{c^j} > \varepsilon$ **alors**

Si $\frac{q \dot{Y}_p^j \frac{\partial P^j}{\partial e} \Big|_{\rho, Y_k}}{\rho^j c (c^j + \bar{u}^j)} > \varepsilon$ **alors**

la solution peut alors évoluer d'un pas de temps supplémentaire

$$j \rightarrow j + 1$$

et l'on retourne alors en d) ;

Sinon

la combustion est pratiquement terminée alors que la condition de sonicité n'a pas été atteinte. La pression P^* initialement choisie est donc trop grande. On change alors une borne du domaine d'existence de la pression solution, c'est à dire

$$P_{\text{sup}} = P^* ,$$

puis on retourne en b) ;

Sinon

Si $\frac{q \dot{Y}_p^j \frac{\partial P^j}{\partial e} \Big|_{\rho, Y_k}}{\rho^j c^j (c^j + \bar{u}^j)} > \varepsilon$, **alors**

la condition de sonicité a été pratiquement atteinte alors que la combustion n'est pas terminée. La pression P^* initialement choisie est donc trop faible. On change alors une borne du domaine d'existence de la pression solution, c'est à dire

$$P_{\text{inf}} = P^* ,$$

puis on retourne en b) ;

Sinon

la vitesse matérielle est pratiquement égale à la vitesse du son et la combustion est pratiquement atteinte. Le choix initial de la pression P^* correspond à la solution stable. On arrête alors le calcul.

Cette méthode a été testé sur un écoulement hypothétique possédant une solution exacte, qui servira à valider les simulations.

En retenant les paramètres suivants

$$\begin{aligned} \gamma &= 3 , \\ q &= 4.5156 \text{ MJ/kg} , \\ k &= 2.10^6 \text{ s}^{-1} , \\ \dot{Y}_p &= k \sqrt{1 - Y_p} , \\ \rho_0 &= 1600 \text{ kg/m}^3 , \end{aligned}$$

on doit obtenir une vitesse de détonation stable $D = 8500 \text{ m/s}$ et des profils de variables d'écoulements qui sont représentés sur la Figure 5.1.

5.2 Résolution du modèle WK

Ce modèle est une extension du modèle ZND. Il comprend

1. les relations de choc

$$\begin{cases} [Y_p] = 0 , \\ [w] = 0 , \\ [\rho (u - D)] = 0 , \\ [\rho u (u - D) + P] = 0 , \\ [\rho E (u - D) + P u] = 0 ; \end{cases}$$

2. les équations de l'écoulement (9) entre le front de choc et la frontière sonique

$$\begin{cases} \frac{d\bar{u}}{dx} = \frac{q \dot{Y}_p \frac{\partial P}{\partial e} \Big|_{\rho, Y_k} - 2 \rho c^2 \hat{w}_0}{\rho (c^2 - \bar{u}^2)} , \\ \frac{d\rho}{dx} = -\frac{\rho}{\bar{u}} \left(\frac{d\bar{u}}{dx} + 2 \hat{w}_0 \right) , \\ \frac{dP}{dx} = -\rho \bar{u} \frac{d\bar{u}}{dx} , \\ \frac{dY_p}{dx} = \frac{\dot{Y}_p}{\bar{u}} ; \end{cases}$$

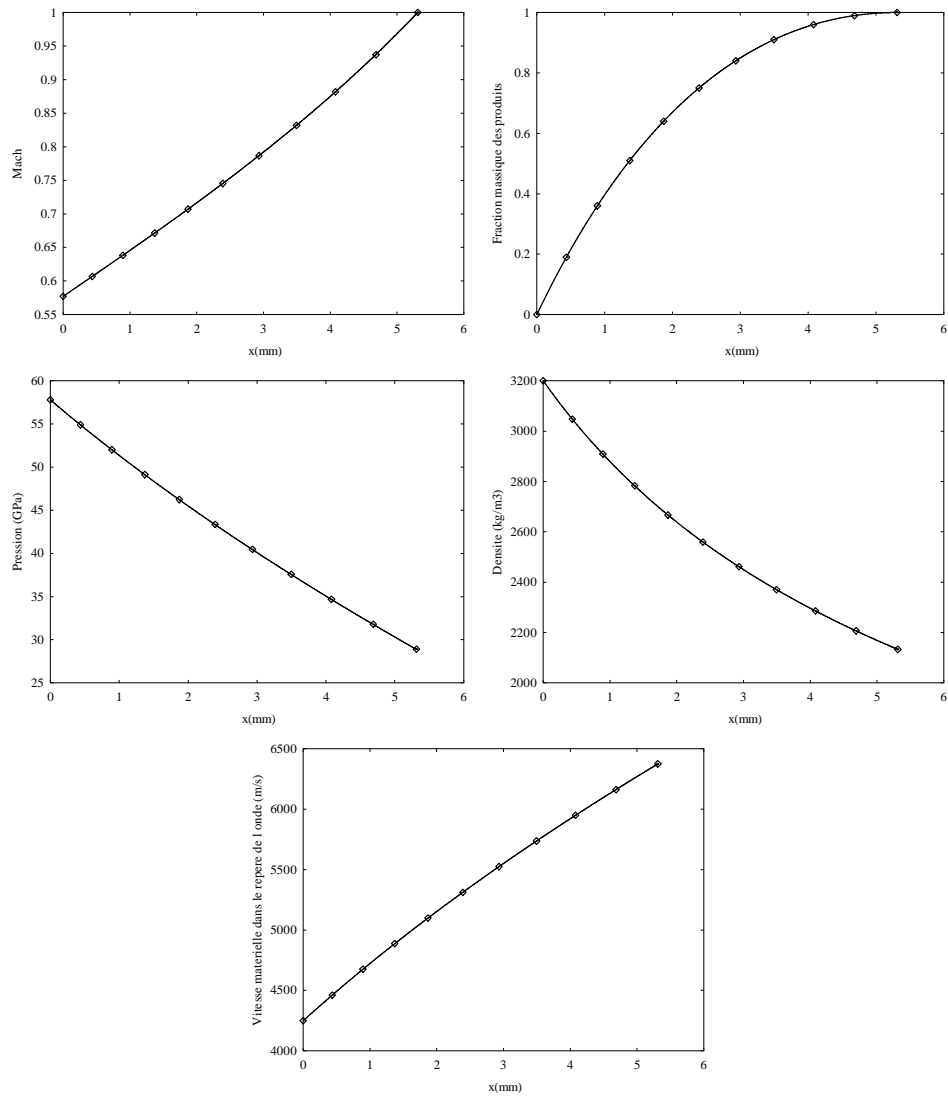


FIG. 2 – Comparaison des variables de l'écoulement entre le front de choc et la surface sonique pour une détonation stable. La solution numérique est représentée en traits continus et la solution exacte, donnée dans Fickett et Davis (1979), est représentée en symboles.

3. l'expression de la divergence radiale de l'écoulement, qui est supposée constante et égale à sa valeur au front de choc

$$\hat{w}_0 = \left. \frac{\partial w}{\partial r} \right|_{r=0} = \frac{D - |\vec{u}_n|(x=0)}{R} = \frac{\bar{u}}{R},$$

où R représente le rayon de courbure de l'onde;

4. les conditions WK sur la frontière sonique

$$q \dot{Y}_p \left. \frac{\partial P}{\partial e} \right|_{\rho, Y_k} - 2 \rho c^2 \hat{w}_0 = 0,$$

lorsque $c^2 = \bar{u}^2$;

Comme précédemment, à l'approche du point sonique, la première équation du système (9) va présenter une singularité. Pour lever cette difficulté on effectue le même changement de variables que précédemment et on obtient le système étendu suivant

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dx}{d\tau} = \frac{c - \bar{u}}{c}, \\ \frac{d\bar{u}}{d\tau} = \frac{q \dot{Y}_p \left. \frac{\partial P}{\partial e} \right|_{\rho, Y_k} - 2 \rho c^2 \hat{w}_0}{\rho c (c + \bar{u})}, \\ \frac{d\rho \bar{u}}{d\tau} = -2 \rho \hat{w}_0 \frac{c - \bar{u}}{c}, \\ \frac{dP}{d\tau} = -\rho \bar{u} \frac{d\bar{u}}{d\tau}, \\ \frac{dY_p}{d\tau} = \frac{\dot{Y}_p}{\bar{u}} \frac{c - \bar{u}}{c}. \end{array} \right. \quad (24)$$

L'algorithme de résolution est inchangé par rapport au précédent, à l'exception de quelques détails :

- a0) tout d'abord, on se donne le rayon de courbure du front R . Suivent alors les séquences a) , b) et c) qui ne subissent aucune modification;
d0) on calcule la divergence radiale de l'écoulement

$$\hat{w}_0 = \frac{\bar{u}}{R};$$

suit alors la séquence d) sans aucune modification; la séquence e) est la plus importante :

- e0) calcul du pseudo-pas de temps assurant la positivité de la solution :
durant l'intégration, la fraction massique des produits ne doit pas dépasser une certaine limite $Y_{\max} < 1$. En effet, les termes de courbure assurent que la combustion ne sera pas totale au point sonique. Cette fraction massique limite est obtenue en annulant le numérateur de l'équation d'évolution de la vitesse. On obtient

$$\dot{Y}_p = \frac{2 \rho c^2 \hat{w}_0}{q \left. \frac{\partial P}{\partial e} \right|_{\rho, Y_k}}.$$

Dans l'exemple utilisé ici la cinétique de décomposition est supposée du type

$$\dot{Y}_p = k \sqrt{1 - Y_p}.$$

On obtient alors, à une itération j donnée

$$Y_{\max}^j = 1 - \left(\frac{2 \rho^j (c^j)^2 \hat{w}_0}{k q \left. \frac{\partial P}{\partial e} \right|_{\rho, Y_k}^j} \right)^2.$$

Néanmoins, l'estimation de cette fraction massique limite est erronée par rapport à la fraction massique limite réelle, lorsque l'état du fluide évolue loin du point sonique. Il faut alors limiter cette estimation à 1 si $Y_{\max}^j < Y_p^j$.

L'application des critères de positivité décrits précédemment conduisent au choix du pas de temps suivant

$$\Delta\tau^{j+1} = \text{CFL} \min \left(\Delta\tau_{Y_p}^{j+1}, \Delta\tau_{\bar{u}}^{j+1} \right),$$

où

$$\begin{cases} \Delta\tau_{Y_p}^{j+1} = \frac{\bar{u}^j c^j (1 - Y_p^j)}{\dot{Y}_p^j (c^j - \bar{u}^j)}, \\ \Delta\tau_{\bar{u}}^{j+1} = \frac{\rho^j c^j ((c^j)^2 - (\bar{u}^j)^2)}{q \dot{Y}_p^j \left. \frac{\partial P}{\partial e} \right|_{\rho, Y_k}^j - 2 \rho^j (c^j)^2 \hat{w}_0}; \end{cases}$$

- f) on fait alors progresser la solution sur un pas de temps $j \rightarrow j + 1$. Pour ce faire, on construit le vecteur des inconnues et le vecteur des termes sources

$$W^j = \begin{pmatrix} x^j \\ \bar{u}^j \\ \rho^j \bar{u}^j \\ P^j \\ Y_p^j \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \dot{W}^j = \begin{pmatrix} \frac{c^j - \bar{u}^j}{c^j} \\ \frac{q \dot{Y}_p^j \left. \frac{\partial P}{\partial e} \right|_{\rho, Y_k}^j - 2 \rho^j (c^j)^2 \hat{w}_0}{\rho^j c^j (c^j + \bar{u}^j)} \\ -2 \rho^j \hat{w}_0 \frac{c^j - \bar{u}^j}{c^j} \\ -\rho^j \bar{u}^j \frac{q \dot{Y}_p^j \left. \frac{\partial P}{\partial e} \right|_{\rho, Y_k}^j - 2 \rho^j (c^j)^2 \hat{w}_0}{\rho^j c^j (c^j + \bar{u}^j)} \\ \frac{\dot{Y}_p^j}{\bar{u}^j} \frac{c^j - \bar{u}^j}{c^j} \end{pmatrix}.$$

La solution évolue comme précédemment, par le schéma d'intégration du premier ordre suivant

$$W^{j+1} = W^j + \Delta\tau^{j+1} \dot{W}^j;$$

- g) on effectue alors une série de tests pour déterminer la pression P^* correspondant à la détonation stable, c'est à dire à celle qui vérifie à la fois les conditions de choc et les conditions de sonicité. Cette recherche est effectuée comme suit :

Si $\frac{c^j - \bar{u}^j}{c^j} > \varepsilon$ **alors**

Si $\frac{q \dot{Y}_p^j \frac{\partial P}{\partial c} \Big|_{\rho, Y_k}^j - 2 \rho^j (c^j)^2 \hat{w}_0}{\rho^j c^j (c^j + \bar{u}^j)} > \varepsilon$ **alors**

la solution peut alors évoluer d'un pas de temps supplémentaire

$$j \rightarrow j + 1$$

et l'on retourne alors en d) ;

Sinon

la combustion a pratiquement atteint son maximum admissible alors que la condition de sonicité n'a pas été atteinte. La pression P^* initialement choisie est donc trop grande. On change alors une borne du domaine d'existence de la pression solution, c'est à dire

$$P_{\text{sup}} = P^* ,$$

puis on retourne en b) ;

Sinon

Si $\frac{q \dot{Y}_p^j \frac{\partial P}{\partial c} \Big|_{\rho, Y_k}^j - 2 \rho^j (c^j)^2 \hat{w}_0}{\rho^j c^j (c^j + \bar{u}^j)} > \varepsilon$ **alors**

la condition de sonicité a été pratiquement atteinte alors que la combustion n'a pas atteint son maximum admissible. La pression P^* initialement choisie est donc trop faible. On change alors une borne du domaine d'existence de la pression solution, c'est à dire

$$P_{\text{inf}} = P^* ,$$

puis on retourne en b) ;

Sinon

la vitesse matérielle est pratiquement égale à la vitesse du son et la combustion a pratiquement atteint son maximum admissible. Le choix initial de la pression P^* correspond à la solution stable. On arrête alors le calcul.

La validation de cette méthode par rapport à une solution exacte n'étant pas possible, nous allons étudier le comportement qualitatif de la solution en faisant varier le rayon de courbure du front de détonation. Plus précisément, on reprend les paramètres

du problème précédent

$$\begin{aligned}\gamma &= 3, \\ q &= 4.5156 \text{ MJ/kg}, \\ k &= 2.10^6 \text{ s}^{-1}, \\ \dot{Y}_p &= k \sqrt{1 - Y_p}, \\ \rho_0 &= 1600 \text{ kg/m}^3,\end{aligned}$$

et on cherche à déterminer la vitesse de détonation stable pour un rayon de courbure donné, ainsi que les profils des variables de l'écoulement. Lorsque la solution stable est obtenue, on cherche à résoudre le même problème pour un autre rayon de courbure.

Dans la première série de calculs, dont les résultats sont représentés sur la figure 3, on a fait varier le rayon de courbure du choc entre 0.1 m et 1 m, par pas de 0.1 m. Pour mémoire, on a laissé figurer le profil exact de la détonation idéale, correspondant à un rayon de courbure infini.

Ces simulations sont poursuivies pour des rayons de courbure variant maintenant entre 0.01 m et 0.1 m par pas de 0.01 m. Les résultats sont représentés sur la figure 4.

Il apparaît que

- la surface sonique est chaque fois atteinte en même temps que la fraction massique des produits atteint son maximum. Ce maximum est d'autant plus petit que le rayon de courbure est petit;
- la distance entre le front de choc et la surface sonique diminue lorsque le rayon de courbure diminue aussi;
- l'intensité de l'onde de choc diminue lorsque le rayon de courbure diminue aussi.

Ces résultats sont en accord avec le comportement qualitatif bien connu des détonations *non idéales*.

Ces simulations sont associées à un résultat complémentaire, relatif à la relation célérité-courbure de l'explosif, comme représenté sur la figure 5.

Cette relation célérité-courbure théorique pourrait être comparée à la relation célérité-courbure expérimentale qui est caractéristique d'un explosif donné. Si la thermodynamique des produits de détonation (ou de leur mélange) est connue sans ambiguïté, cette relation peut être mise à profit pour déterminer la cinétique de décomposition de l'explosif.

Le modèle multiphasique a justement été mis au point pour que la thermodynamique du mélange ne comporte pas d'ambiguïté. C'est dans ce contexte qu'il est maintenant nécessaire de résoudre le modèle multiphasique pour déterminer la relation célérité-courbure et la comparer avec l'expérience afin d'en déduire la cinétique de décomposition.

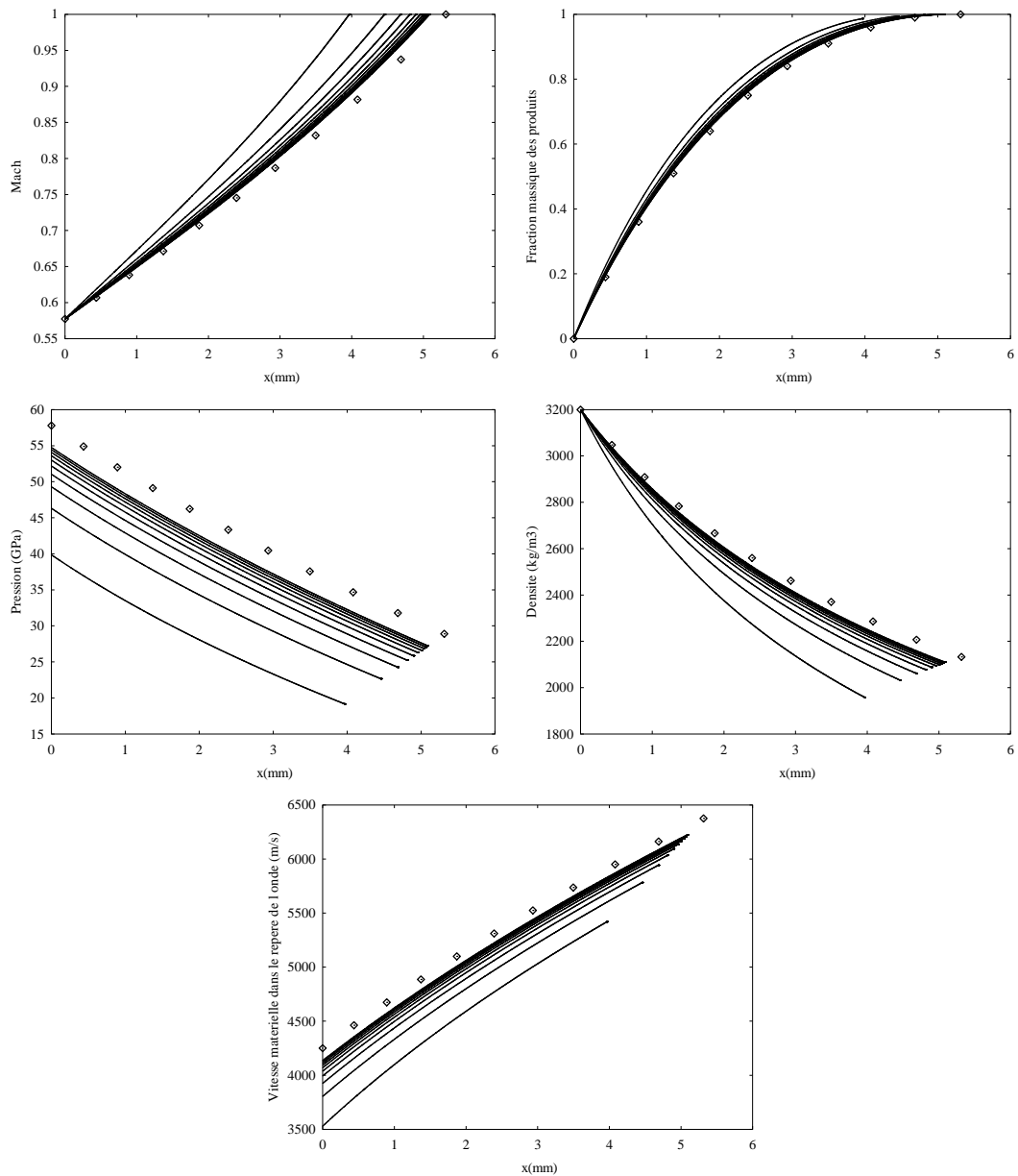


FIG. 3 – Évolutions des variables de l'écoulement entre le front de choc et la surface sonique pour des détonations à front courbé. Le rayon de courbure varie entre 0.1 m et 1 m par pas de 0.1 m. Les solutions numériques sont représentées en traits continus et la solution exacte dans le cas d'un rayon de courbure infini est représentée en symboles.

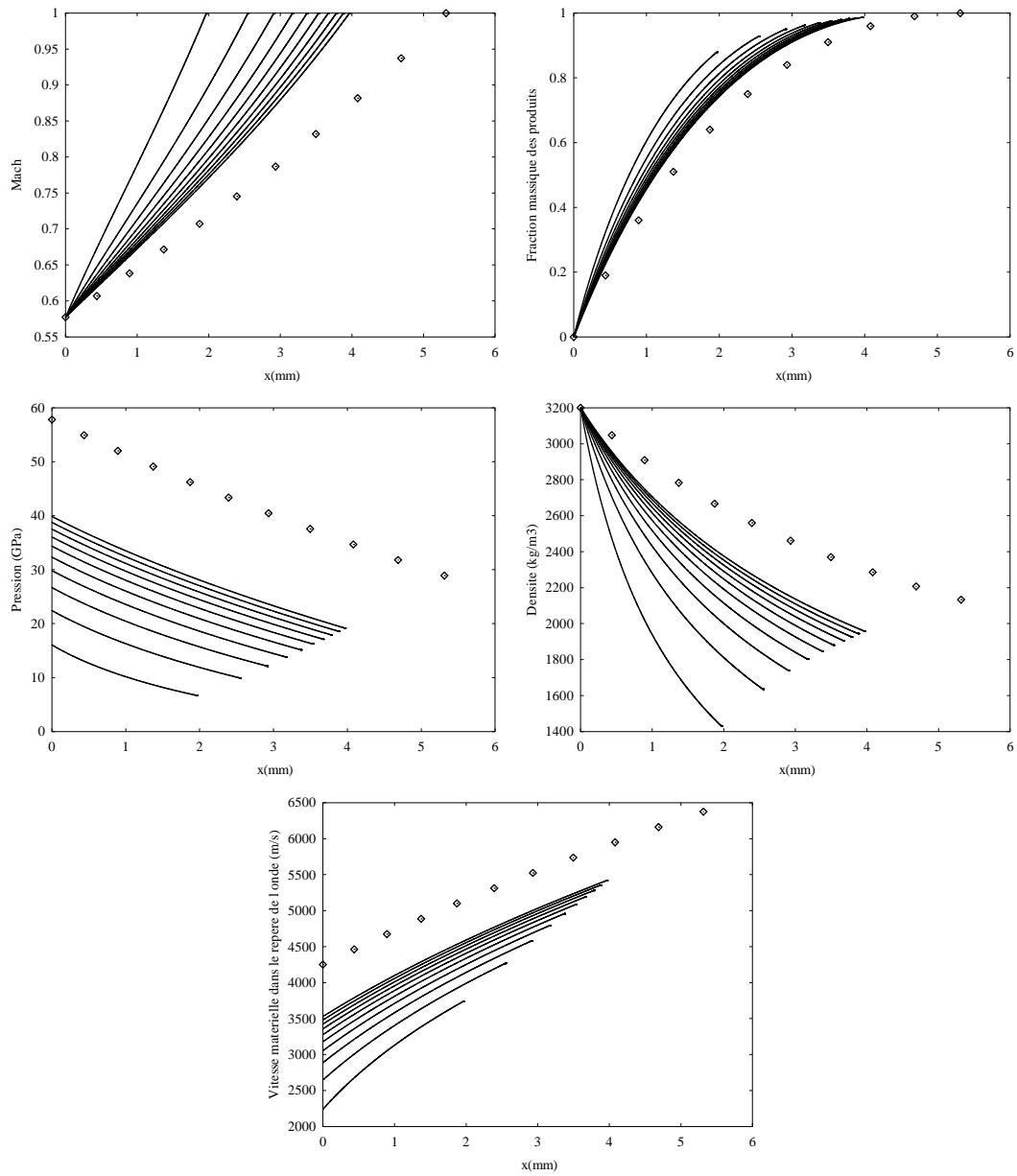


FIG. 4 – Évolutions des variables de l'écoulement entre le front de choc et la surface sonique pour des détonations à front courbé. Le rayon de courbure varie entre 0.1 m et 1 m par pas de 0.1 m. Les solutions numériques sont représentées en traits continus et la solution exacte dans le cas d'un rayon de courbure infini est représentée en symboles.

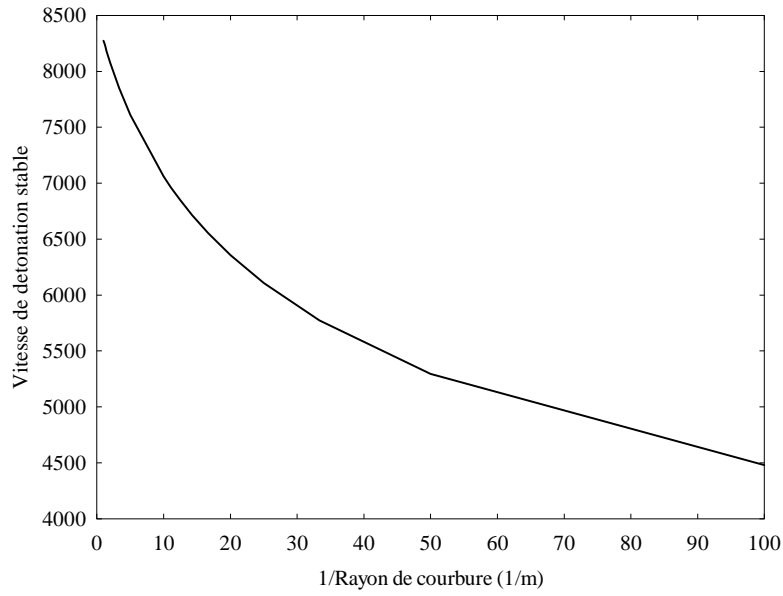


FIG. 5 – Relation célérité - courbure théorique de l'explosif étudié.

5.3 Résolution du modèle multiphasique

Ce modèle a été établi dans le présent document pour la première fois. Il comprend

1. les relations de choc

$$\left\{ \begin{array}{l} [Y_p] = 0, \\ [w] = 0, \\ [\rho (u - \sigma)] = 0, \\ [\rho u (u - \sigma) + P] = 0, \\ e_k - e_k^0 + \frac{P + P_0}{2} (\nu_k - \nu_k^0) = 0; \end{array} \right. \quad (25)$$

2. les équations de l'écoulement (21) entre le front de choc et la frontière sonique

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho (c^2 - \bar{u}^2) \frac{d\bar{u}}{dx} = \\ -2\rho c^2 \hat{w}_0 + \frac{\Gamma_1 \rho_2 c_2^2 - \Gamma_2 \rho_1 c_1^2}{\alpha_2 \rho_1 c_1^2 + \alpha_1 \rho_2 c_2^2} H(T_2 - T_1) + \\ + \left[\frac{\alpha_2 c_1^2 + \alpha_1 c_2^2}{\alpha_1 \Gamma_2 + \alpha_2 \Gamma_1} \frac{\Gamma_1 \rho_2 c_2^2 - \Gamma_2 \rho_1 c_1^2}{\alpha_2 \rho_1 c_1^2 + \alpha_1 \rho_2 c_2^2} + \frac{\Gamma_1 \Gamma_2}{\alpha_1 \Gamma_2 + \alpha_2 \Gamma_1} \left((h_2 - \frac{c_2^2}{\Gamma_2}) - (h_1 - \frac{c_1^2}{\Gamma_1}) \right) \right] \rho \dot{Y}_1, \\ \frac{d\rho}{dx} = -\frac{\rho}{\bar{u}} \left(\frac{d\bar{u}}{dx} + 2\hat{w}_0 \right), \\ \frac{dP}{dx} = -\rho \bar{u} \frac{d\bar{u}}{dx}, \\ \frac{dY_1}{dx} = \frac{\dot{Y}_1}{\bar{u}}, \\ \frac{d\alpha_1}{dx} = \frac{(\rho_2 c_2^2 - \rho_1 c_1^2) \left(\frac{d\bar{u}}{dx} + 2\hat{w}_0 \right) + H(T_2 - T_1) \left(\frac{\Gamma_1}{\alpha_1} + \frac{\Gamma_2}{\alpha_2} \right) + \rho \dot{Y}_1 \left(\frac{c_1^2}{\alpha_1} + \frac{c_2^2}{\alpha_2} \right)}{\bar{u} \left(\frac{\rho_1 c_1^2}{\alpha_1} + \frac{\rho_2 c_2^2}{\alpha_2} \right)}; \end{array} \right.$$

3. l'expression de la divergence radiale de l'écoulement, qui est supposée constante et égale à sa valeur au front de choc

$$\hat{w}_0 = \left. \frac{\partial w}{\partial r} \right|_{r=0} = (\sigma - |\vec{u}_n|(x=0)) / R = \frac{\bar{u}}{R},$$

où R représente le rayon de courbure de l'onde;

4. les conditions (22) sur la frontière sonique

$$\begin{aligned} & -2\rho c^2 \hat{w}_0 + \frac{\Gamma_1 \rho_2 c_2^2 - \Gamma_2 \rho_1 c_1^2}{\alpha_2 \rho_1 c_1^2 + \alpha_1 \rho_2 c_2^2} H(T_2 - T_1) + \\ & + \left[\frac{\alpha_2 c_1^2 + \alpha_1 c_2^2}{\alpha_1 \Gamma_2 + \alpha_2 \Gamma_1} \frac{\Gamma_1 \rho_2 c_2^2 - \Gamma_2 \rho_1 c_1^2}{\alpha_2 \rho_1 c_1^2 + \alpha_1 \rho_2 c_2^2} + \frac{\Gamma_1 \Gamma_2}{\alpha_1 \Gamma_2 + \alpha_2 \Gamma_1} \left((h_2 - \frac{c_2^2}{\Gamma_2}) - (h_1 - \frac{c_1^2}{\Gamma_1}) \right) \right] \rho \dot{Y}_1 = 0, \end{aligned}$$

lorsque $c^2 = \bar{u}^2$.

Comme précédemment, à l'approche du point sonique, la première équation du système (21) va présenter une singularité. Pour lever cette difficulté, on effectue le même

changement de variables que précédemment et on obtient le système étendu suivant

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dx}{d\tau} = \frac{c - \bar{u}}{c}, \\ \frac{d\bar{u}}{d\tau} = \frac{1}{\rho c (c + \bar{u})} \times \\ \quad \left\{ -2 \rho c^2 \hat{w}_0 + \frac{\Gamma_1 \rho_2 c_2^2 - \Gamma_2 \rho_1 c_1^2}{\alpha_2 \rho_1 c_1^2 + \alpha_1 \rho_2 c_2^2} H(T_2 - T_1) + \rho \dot{Y}_1 \times \right. \\ \quad \left. \left[\frac{\alpha_2 c_1^2 + \alpha_1 c_2^2}{\alpha_1 \Gamma_2 + \alpha_2 \Gamma_1} \frac{\Gamma_1 \rho_2 c_2^2 - \Gamma_2 \rho_1 c_1^2}{\alpha_2 \rho_1 c_1^2 + \alpha_1 \rho_2 c_2^2} + \frac{\Gamma_1 \Gamma_2}{\alpha_1 \Gamma_2 + \alpha_2 \Gamma_1} \left((h_2 - \frac{c_2^2}{\Gamma_2}) - (h_1 - \frac{c_1^2}{\Gamma_1}) \right) \right] \right\}, \\ \frac{d(\rho \bar{u})}{d\tau} = -2 \rho \hat{w}_0 \frac{c - \bar{u}}{c}, \\ \frac{dP}{d\tau} = -\rho \bar{u} \frac{d\bar{u}}{d\tau}, \\ \frac{dY_1}{d\tau} = \frac{\dot{Y}_1}{\bar{u}} \frac{c - \bar{u}}{c}, \\ \frac{d\alpha_1}{d\tau} = \frac{c - \bar{u}}{c} \frac{(\rho_2 c_2^2 - \rho_1 c_1^2) \left(\frac{d\bar{u}}{dx} + 2 \hat{w}_0 \right) + H(T_2 - T_1) \left(\frac{\Gamma_1}{\alpha_1} + \frac{\Gamma_2}{\alpha_2} \right) + \rho \dot{Y}_1 \left(\frac{c_1^2}{\alpha_1} + \frac{c_2^2}{\alpha_2} \right)}{\bar{u} \left(\frac{\rho_1 c_1^2}{\alpha_1} + \frac{\rho_2 c_2^2}{\alpha_2} \right)}. \end{array} \right.$$

Afin d'éviter les singularités sur cette dernière équation, on la réécrit de la façon suivante

$$\frac{d\alpha_1}{d\tau} = \frac{c - \bar{u}}{c} \frac{\alpha_1 \alpha_2 (\rho_2 c_2^2 - \rho_1 c_1^2) \left(\frac{d\bar{u}}{dx} + 2 \hat{w}_0 \right) + H(T_2 - T_1) (\alpha_2 \Gamma_1 + \alpha_1 \Gamma_2) + \rho \dot{Y}_1 (\alpha_2 c_1^2 + \alpha_1 c_2^2)}{\bar{u} (\alpha_2 \rho_1 c_1^2 + \alpha_1 \rho_2 c_2^2)}.$$

Une modification supplémentaire sur cette équation est nécessaire. Elle fait en effet intervenir la divergence longitudinale de vitesse $\frac{d\bar{u}}{dx}$ alors que la résolution du système porte maintenant sur $\frac{d\bar{u}}{d\tau}$. Or

$$\frac{d\bar{u}}{dx} = \frac{d\bar{u}}{d\tau} \frac{d\tau}{dx} = \frac{d\bar{u}}{d\tau} \frac{c}{c - \bar{u}}.$$

En raison du numérateur qui peut tendre vers zéro, on introduira ce terme dans l'équation sur la fraction volumique de la façon suivante

$$\frac{d\alpha_1}{d\tau} = \frac{\alpha_1 \alpha_2 (\rho_2 c_2^2 - \rho_1 c_1^2) \left(\frac{d\bar{u}}{d\tau} + 2 \frac{c - \bar{u}}{c} \hat{w}_0 \right) + \frac{c - \bar{u}}{c} \left[H(T_2 - T_1) (\alpha_2 \Gamma_1 + \alpha_1 \Gamma_2) + \rho \dot{Y}_1 (\alpha_2 c_1^2 + \alpha_1 c_2^2) \right]}{\bar{u} (\alpha_2 \rho_1 c_1^2 + \alpha_1 \rho_2 c_2^2)}.$$

Une dernière remarque est nécessaire. Tout d'abord, l'équation d'évolution de la vitesse peut être écrite sous une forme plus concise; plus particulièrement, la somme des deux termes en facteur du terme de transfert de masse $\rho \dot{Y}_1$ dans le second membre de l'équation portant sur \bar{u} se réécrit

$$\left[\left(\frac{\rho_2 c_2^2}{\Gamma_2} - \frac{\rho_1 c_1^2}{\Gamma_1} \right) \frac{\alpha_2 c_1^2 + \alpha_1 c_2^2}{\alpha_2 \rho_1 c_1^2 + \alpha_1 \rho_2 c_2^2} + \left((h_2 - \frac{c_2^2}{\Gamma_2}) - (h_1 - \frac{c_1^2}{\Gamma_1}) \right) \right] \frac{\Gamma_1 \Gamma_2}{\alpha_1 \Gamma_2 + \alpha_2 \Gamma_1}.$$

Nous allons analyser les deux termes formant la somme ayant $\Gamma_1 \Gamma_2 / (\alpha_1 \Gamma_2 + \alpha_2 \Gamma_1)$ comme facteur commun. Examinons tout d'abord la différence

$$(h_2 - \frac{c_2^2}{\Gamma_2}) - (h_1 - \frac{c_1^2}{\Gamma_1})$$

dans le cas de l'équation d'état des gaz raides; les différentes fonctions thermodynamiques d'une phase quelconque s'écrivent alors dans ce cas

$$\left\{ \begin{array}{l} P = (\gamma - 1) \rho (e - e_0) - \gamma P_\infty , \\ e = \frac{P + \gamma P_\infty}{(\gamma - 1) \rho} + e_0 , \\ h = e + \frac{P}{\rho} = \frac{\gamma (P + P_\infty)}{(\gamma - 1) \rho} + e_0 , \\ c^2 = \frac{\gamma (P + P_\infty)}{\rho} , \\ T = \frac{h - e_0}{\gamma C_v} . \end{array} \right.$$

Pour le présent propos, les seules définitions de l'enthalpie et de la vitesse du son suffisent. Pour cette équation d'état, le coefficient de Grüneisen se réduit à $\Gamma = \gamma - 1$, de sorte que $h - \frac{c^2}{\Gamma} = e_0$. Ainsi, un des deux termes en facteur du transfert de masse s'écrit, du moins pour l'équation des gaz raides

$$\left(h_2 - \frac{c_2^2}{\Gamma_2} \right) - \left(h_1 - \frac{c_1^2}{\Gamma_1} \right) = e_2^0 - e_1^0 .$$

Il n'est en rien surprenant que ce terme soit présent. Mais il est plus étonnant qu'une autre énergie vienne s'ajouter à cette différence. Il s'agit du second terme

$$\left(\frac{\rho_2 c_2^2}{\Gamma_2} - \frac{\rho_1 c_1^2}{\Gamma_1} \right) \frac{\alpha_2 c_1^2 + \alpha_1 c_2^2}{\alpha_2 \rho_1 c_1^2 + \alpha_1 \rho_2 c_2^2} ,$$

que nous allons examiner à présent. En se souvenant de la définition de la masse volumique moyenne aux interfaces

$$\rho_I = \frac{\frac{\rho_1 c_1^2}{\alpha_1} + \frac{\rho_2 c_2^2}{\alpha_2}}{\frac{c_1^2}{\alpha_1} + \frac{c_2^2}{\alpha_2}} ,$$

ce terme se réduit à

$$\frac{\frac{\rho_2 c_2^2}{\Gamma_2} - \frac{\rho_1 c_1^2}{\Gamma_1}}{\rho_I} .$$

Dans le cas de l'équation des gaz raides, ce terme s'écrit

$$\frac{\frac{\rho_2 c_2^2}{\Gamma_2} - \frac{\rho_1 c_1^2}{\Gamma_1}}{\rho_I} = \frac{1}{\rho_I} \left\{ \left(\frac{\gamma_2}{\gamma_2 - 1} - \frac{\gamma_1}{\gamma_1 - 1} \right) P + \left(\frac{\gamma_2 P_{\infty 2}}{\gamma_2 - 1} - \frac{\gamma_1 P_{\infty 1}}{\gamma_1 - 1} \right) \right\} .$$

Supposons, comme nous l'avons fait depuis le début, que la phase 1 corresponde aux produits gazeux ($\gamma_1 = 3$, $P_{\infty 1} = 0$) et que la phase 2 corresponde à la phase solide réactive ($\gamma_2 = 3$ par exemple, et $P_{\infty 2} > 0$). Dans ce cas, le terme précédent se réduit à

$$\frac{\frac{\rho_2 c_2^2}{\Gamma_2} - \frac{\rho_1 c_1^2}{\Gamma_1}}{\rho_I} = \frac{\gamma_2 P_{\infty 2}}{\rho_I (\gamma_2 - 1)} ,$$

ce qui correspond à une énergie nullement négligeable puisque typiquement $P_{\infty 2}$ est de l'ordre de 10^9 Pa. Ainsi, l'énergie contenue dans le terme que nous venons d'examiner, est du même ordre que l'énergie contenue dans le terme $(h_2 - \frac{c_2^2}{\Gamma_2}) - (h_1 - \frac{c_1^2}{\Gamma_1})$. La première de ces deux énergies correspond aux liaisons cristallines ou intermoléculaires qui font qu'une phase condensée reste dans un état condensé. La deuxième énergie correspond aux liaisons moléculaires. Ces deux énergies sont en effet libérées lors de la décomposition du matériau. La signification de ces termes est maintenant plus claire.

On peut donc maintenant entamer la résolution du système, que l'on considère sous la forme suivante

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dx}{d\tau} = \frac{c - \bar{u}}{c}, \\ \frac{d\bar{u}}{d\tau} = \frac{1}{\rho c (c + \bar{u})} \times \\ \left\{ -2 \rho c^2 \hat{w}_0 + \frac{\Gamma_1 \rho_2 c_2^2 - \Gamma_2 \rho_1 c_1^2}{\alpha_2 \rho_1 c_1^2 + \alpha_1 \rho_2 c_2^2} H(T_2 - T_1) + \frac{\Gamma_1 \Gamma_2}{\alpha_1 \Gamma_2 + \alpha_2 \Gamma_1} \rho \dot{Y}_1 \times \right. \\ \left. \left[\left(\frac{\rho_2 c_2^2}{\Gamma_2} - \frac{\rho_1 c_1^2}{\Gamma_1} \right) \frac{\alpha_2 c_1^2 + \alpha_1 c_2^2}{\alpha_2 \rho_1 c_1^2 + \alpha_1 \rho_2 c_2^2} + \left((h_2 - \frac{c_2^2}{\Gamma_2}) - (h_1 - \frac{c_1^2}{\Gamma_1}) \right) \right] \right\}, \\ \frac{d(\rho \bar{u})}{d\tau} = -2 \rho \hat{w}_0 \frac{c - \bar{u}}{c}, \\ \frac{dP}{d\tau} = -\rho \bar{u} \frac{d\bar{u}}{d\tau}, \\ \frac{dY_1}{d\tau} = \frac{\dot{Y}_1}{\bar{u}} \frac{c - \bar{u}}{c}, \\ \frac{d\alpha_1}{d\tau} = \frac{\alpha_1 \alpha_2 (\rho_2 c_2^2 - \rho_1 c_1^2) \left(\frac{d\bar{u}}{d\tau} + 2 \frac{c - \bar{u}}{c} \hat{w}_0 \right) + \frac{c - \bar{u}}{c} \left[H(T_2 - T_1) (\alpha_2 \Gamma_1 + \alpha_1 \Gamma_2) + \rho \dot{Y}_1 (\alpha_2 c_1^2 + \alpha_1 c_2^2) \right]}{\bar{u} (\alpha_2 \rho_1 c_1^2 + \alpha_1 \rho_2 c_2^2)}. \end{array} \right. \quad (26)$$

Ce système peut s'écrire sous la forme

$$\frac{dW}{d\tau} = \dot{W}(W, \tau),$$

avec $W = (x, \bar{u}, \rho \bar{u}, P, Y_1, \alpha_1)^T$, le vecteur d'inconnues à 6 variables et $\dot{W}(W)$ le vecteur terme source à 6 composantes.

L'algorithme de résolution est proche des méthodes précédemment utilisées, avec les mêmes conventions de notations que celles utilisées dans les 2 algorithmes précédents (itération j , τ^j etc.), hormis les quelques détails que nous signalons ci-après :

- on se donne un intervalle de pression $[P_{\text{inf}}, P_{\text{sup}}]$ dans lequel la pression au choc P^* est supposée appartenir;
- on fixe arbitrairement une pression P^* dans cet intervalle. Par exemple

$$P^* = \frac{P_{\text{inf}} + P_{\text{sup}}}{2};$$

- c) on calcule l'état derrière le choc : masses volumiques de chaque phase ρ_1^* , ρ_2^* desquelles on déduit la masse volumique du mélange ρ^* , puis les fractions volumiques α_1^* , $\alpha_2^* = 1 - \alpha_1^*$ et enfin la vitesse \bar{u}^* du milieu choqué dans le repère de l'onde. Les conditions initiales du système (26) sont alors déterminées;
- d) on calcule toutes les fonctions thermodynamiques intervenant dans le calcul des termes sources (évaluées au temps τ_j , pour un schéma d'intégration du premier ordre);
- e) on calcule alors les termes sources de ce système (le vecteur \dot{W}^j (W^j));
- f) on calcule les pas de pseudo-temps assurant la positivité de la solution, de la façon suivante : durant l'intégration, la fraction massique des produits doit rester positive et inférieure à 1 dans la zone de réaction, c'est à dire

$$Y_1 \leq 1 .$$

Dans le cas d'une méthode d'intégration d'ordre 1, la fraction massique va évoluer suivant le schéma

$$Y_1^{j+1} = Y_1^j + \Delta\tau^{j+1} \dot{W}^j(5) .$$

L'inégalité précédente devient alors

$$Y_1^j + \Delta\tau^{j+1} \dot{W}^j(5) \leq 1 .$$

Ce qui nous donne le critère sur le pas d'intégration suivant

$$\Delta\tau^{j+1} \leq \frac{1 - Y_1^j}{\dot{W}^j(5)} = \Delta\tau_{Y_1}^{j+1} .$$

De la même façon, en tout point de l'écoulement, la vitesse matérielle doit rester inférieure à la vitesse du son

$$\bar{u}^{j+1} \leq c^{j+1} .$$

Dans le cadre d'une méthode d'intégration d'ordre 1, la vitesse va évoluer suivant le schéma

$$\bar{u}^{j+1} = \bar{u}^j + \Delta\tau^{j+1} \dot{W}^j(2) ,$$

de sorte que l'inégalité précédente devient

$$\bar{u}^j + \Delta\tau^{j+1} \dot{W}^j(2) \leq c^j .$$

Ceci nous donne un second critère sur le pas d'intégration

$$\Delta\tau^{j+1} \leq \frac{c^j - \bar{u}^j}{\dot{W}^j(2)} = \Delta\tau_{\bar{u}}^{j+1} .$$

L'application du même raisonnement à la fraction volumique, qui doit elle aussi rester inférieure à 1 ($\alpha_1^{j+1} \leq 1$) conduit à la troisième condition supplémentaire suivante du pas de pseudo-temps à l'itération $j + 1$

$$\Delta\tau^{j+1} \leq \frac{1 - \alpha_1^j}{\dot{W}^j(6)} = \Delta\tau_{\alpha_1}^{j+1} .$$

Afin que le pas de temps global satisfasse aux trois critères précédents, on prendra

$$\Delta\tau^{j+1} = \text{CFL} \min \left(\Delta\tau_{Y_1}^{j+1}, \Delta\tau_{\bar{u}}^{j+1}, \Delta\tau_{\alpha_1}^{j+1} \right).$$

En prenant par exemple $\text{CFL} = 10^{-3}$, on sera assuré qu'environ 1 000 points d'intégration seront présents dans la zone de réaction;

- g) on fait alors progresser la solution sur un pas de temps $j \rightarrow j+1$ dont le schéma à l'ordre 1 s'écrit

$$W^{j+1} = W^j + \Delta\tau^{j+1} \dot{W}^j;$$

- h) on effectue alors une série de tests pour déterminer si la pression P^* correspond bien à la détonation stable, c'est à dire à celle qui vérifie à la fois les conditions de choc et les conditions de sonicité. Cette recherche est effectuée ainsi

Si $\dot{W}^{j+1}(1) > \varepsilon$ **alors**

Si $\dot{W}^{j+1}(2) > \varepsilon$ **alors**

la solution peut alors évoluer d'un pas de temps supplémentaire

$$j \rightarrow j + 1$$

puis on retourne alors en d);

Sinon

la combustion est pratiquement terminée alors que la condition de sonicité n'a pas été atteinte. La pression P^* initialement choisie est donc trop grande. On change alors une borne du domaine d'existence de la pression solution, c'est à dire

$$P_{\text{sup}} = P^*,$$

puis on retourne en b);

Sinon

Si $\dot{W}^{j+1}(2) > \varepsilon$ **alors**

la condition de sonicité a été pratiquement atteinte alors que la combustion n'est pas terminée. La pression P^* initialement choisie est donc trop faible. On change alors une borne du domaine d'existence de la pression solution, c'est à dire

$$P_{\text{inf}} = P^*,$$

puis on retourne en b);

Sinon

la vitesse matérielle est pratiquement égale à la vitesse du son et la combustion est pratiquement atteinte. Le choix initial de la pression P^* correspond à la solution stable. On arrête alors le calcul.

La validation du code de calcul va maintenant être réalisée sur une série de cas tests, de difficulté croissante qui vont confirmer les propriétés du modèle, en particulier les conditions de stabilité des détonations multiphasiques.

5.3.1 Test 1 : limite monophasique

Le modèle doit reproduire les résultats de référence du cas monophasique lorsque les paramètres d'équation d'état des deux constituants sont les mêmes. Ainsi, les paramètres de la simulation ont été choisis avec les valeurs suivantes

$$\begin{aligned} \gamma_1 &= 3, & \gamma_2 &= 3, \\ P_{\infty 1} &= 0 \text{ Pa}, & P_{\infty 2} &= 0 \text{ Pa}, \\ C_{v1} &= 1000 \text{ J/kg/K}, & C_{v2} &= 1000 \text{ J/kg/K}, \\ \rho_{01} &= 1600 \text{ kg/m}^3, & \rho_{02} &= 1600 \text{ kg/m}^3, \\ e_{01} &= -4.5156 \text{ MJ/kg}, & e_{02} &= 0 \text{ MJ/kg}. \end{aligned}$$

Avec ce jeu de données, on peut s'assurer que l'énergie libérée aux produits correspond bien à celle utilisée précédemment dans le cas monophasique

$$q = e_{02} - e_{01} = 4.5156 \text{ MJ/kg}.$$

La cinétique réactionnelle est gardée identique

$$\dot{Y}_p = k \sqrt{1 - Y_p},$$

avec $k = 2.10^6 \text{ s}^{-1}$; le coefficient d'échange de chaleur H est pris égal à zéro : ceci n'a aucune importance, de même que le choix des capacités calorifiques à volume constant car dans la présente limite, le terme d'échange de chaleur dans l'équation d'évolution de la vitesse s'écrit

$$\frac{\Gamma_1 \rho_2 c_2^2 - \Gamma_2 \rho_1 c_1^2}{\alpha_2 \rho_1 c_1^2 + \alpha_1 \rho_2 c_2^2} H(T_2 - T_1) = \frac{((\gamma_1 - 1) \gamma_1 - (\gamma_2 - 1) \gamma_2) P}{\alpha_2 \rho_1 c_1^2 + \alpha_1 \rho_2 c_2^2} H(T_2 - T_1) = 0,$$

puisque $\gamma_1 = \gamma_2$.

On doit obtenir une vitesse de détonation stable $\sigma = 8500 \text{ m/s}$. Les profils des variables de l'écoulement sont comparés à la solution exacte de Fickett et Davis sur la figure 6.

L'accord obtenu par la solution numérique est excellent.

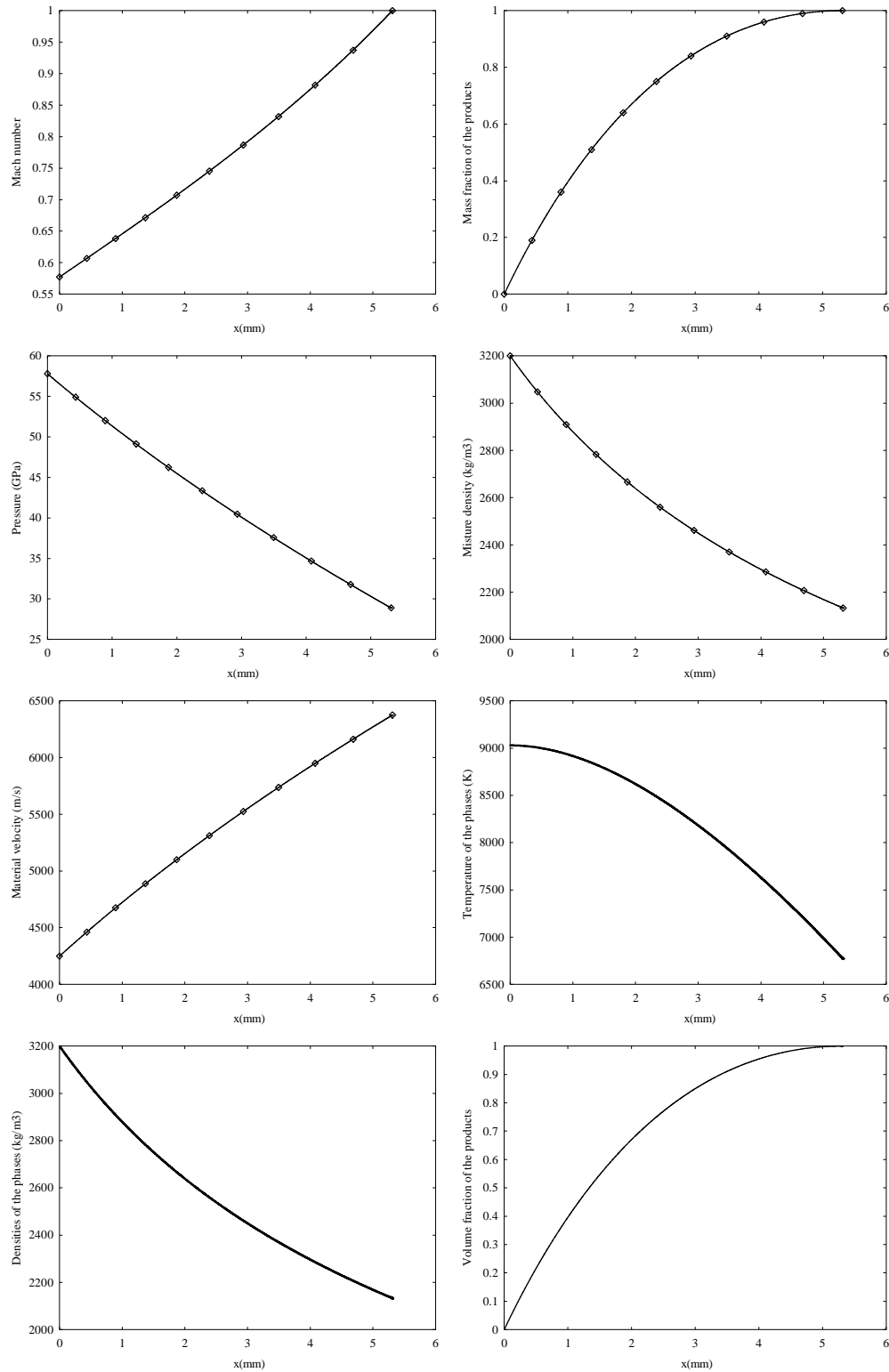


FIG. 6 – Comparaison des variables de l'écoulement entre le front de choc et la surface sonique pour une détonation stable multiphasique dans la limite monophasique. La solution numérique est représentée en traits continus et la solution exacte, donnée dans Fickett et Davis (1979), est représentée en symboles.

5.3.2 Test 2 : limite monophasique avec échange de chaleur

Nous avons signalé précédemment que, dans la limite monophasique, les échanges de chaleur n'allaient en rien venir modifier la dynamique de la détonation. Toutefois, il est important de s'assurer que le terme d'échange de chaleur présent dans l'équation sur la fraction volumique conduit bien à une relaxation des températures. C'est ce que nous allons vérifier au travers de deux simulations.

Dans le premier cas, on reprend les paramètres de la simulation précédente en changeant la capacité calorifique du réactif

$$\begin{aligned} \gamma_1 &= 3, & \gamma_2 &= 3, \\ P_{\infty 1} &= 0 \text{ Pa}, & P_{\infty 2} &= 0 \text{ Pa}, \\ C_{v1} &= 1000 \text{ J/kg/K}, & C_{v2} &= 4000 \text{ J/kg/K}, \\ \rho_{01} &= 1600 \text{ kg/m}^3, & \rho_{02} &= 1600 \text{ kg/m}^3, \\ e_{01} &= -4.5156 \text{ MJ/kg}, & e_{02} &= 0 \text{ MJ/kg}. \end{aligned}$$

La cinétique réactionnelle est gardée identique. Le coefficient d'échange de chaleur H est pris égal à une valeur constante

$$H = 10^{12} \text{ W/K}.$$

Les profils des variables de l'écoulement sont comparés à la solution exacte de Fickett et Davis sur la figure 7.

Il apparaît clairement que les températures et les masses volumiques des phases sont différentes en tout point, sauf à l'approche du point sonique où les températures deviennent égales. En effet, le coefficient d'échange est trop faible pour les faire relaxer plus tôt dans l'écoulement. La relaxation se produit lorsque la masse d'une des deux phases diminue, et donc son inertie thermique diminue.

Afin de confirmer cette interprétation, réalisons une nouvelle simulation avec un coefficient d'échange plus grand ($H = 10^{13} \text{ W/K}$). Les variations étant plus violentes, il est nécessaire pour la convergence des calculs d'utiliser un pas d'espace plus petit. Ceci est réalisé en prenant le coefficient CFL à 10^{-4} au lieu de $CFL = 10^{-3}$. Les résultats sont représentés sur la figure 8.

Il apparaît maintenant une relaxation très rapide des températures, ce qui a des conséquences importantes sur les masses volumiques des phases ainsi que sur la fraction volumique, mais nullement sur les autres variables de l'écoulement.

5.3.3 Test 3 : mélange de deux gaz parfaits sans échange de chaleur

Considérons maintenant le cas d'un écoulement diphasique le plus simple : deux gaz parfaits évoluent en déséquilibre de température sans échanger de la chaleur. On reprend les paramètres de la simulation précédente en changeant le coefficient polytropique du réactif

$$\begin{aligned} \gamma_1 &= 3, & \gamma_2 &= 4, \\ P_{\infty 1} &= 0 \text{ Pa}, & P_{\infty 2} &= 0 \text{ Pa}, \\ C_{v1} &= 1000 \text{ J/kg/K}, & C_{v2} &= 4000 \text{ J/kg/K}, \\ \rho_{01} &= 1600 \text{ kg/m}^3, & \rho_{02} &= 1600 \text{ kg/m}^3, \\ e_{01} &= -4.5156 \text{ MJ/kg}, & e_{02} &= 0 \text{ MJ/kg}. \end{aligned}$$

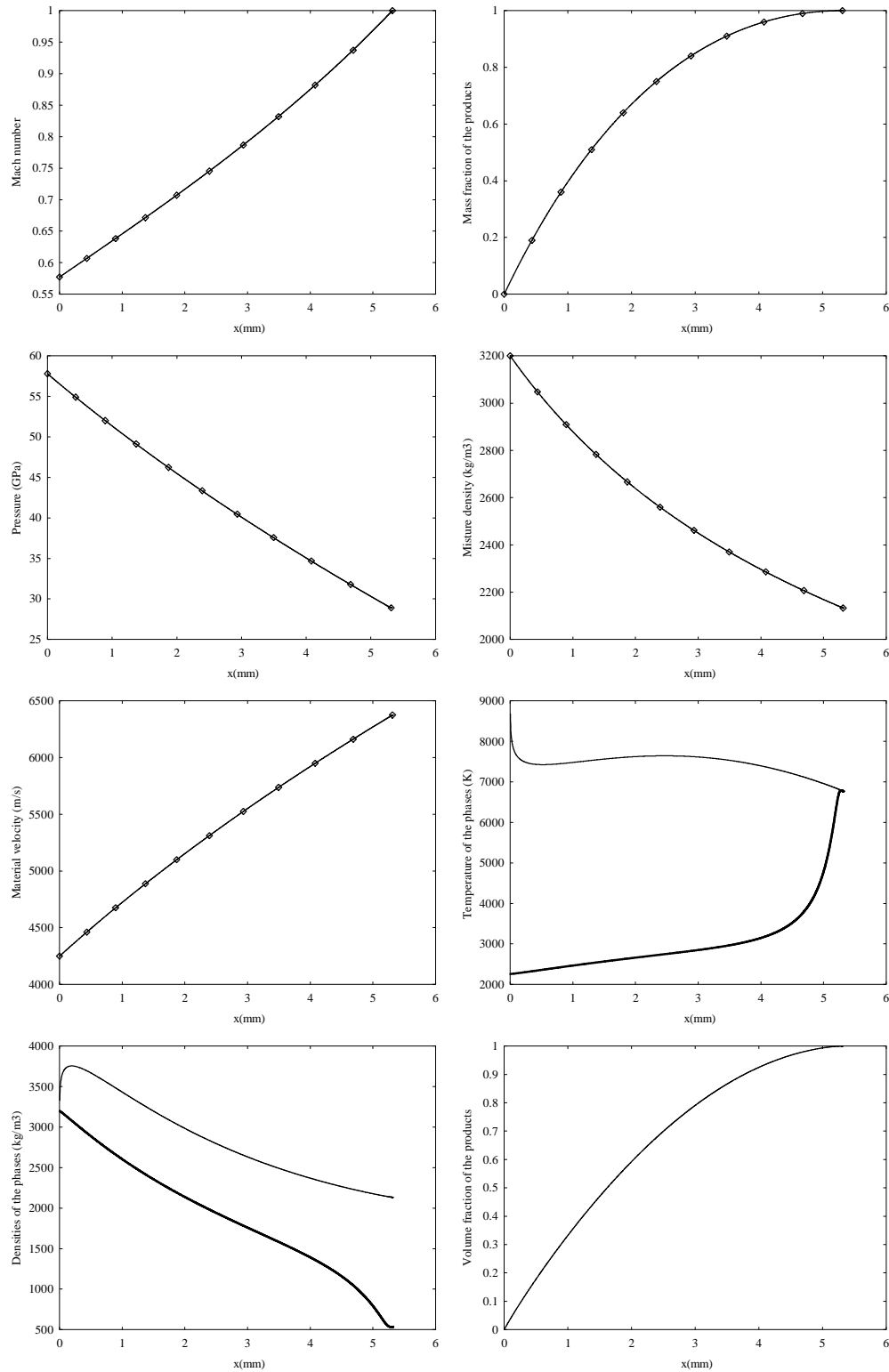


FIG. 7 – Comparaison des variables de l'écoulement entre le front de choc et la surface sonique pour une détonation stable multiphasique dans la limite monophasique avec un échange de chaleur pris égal à $H = 10^{12}$ W/K. La solution numérique est représentée en traits continus et la solution exacte, donnée dans Fickett et Davis (1979), est représentée en symboles.

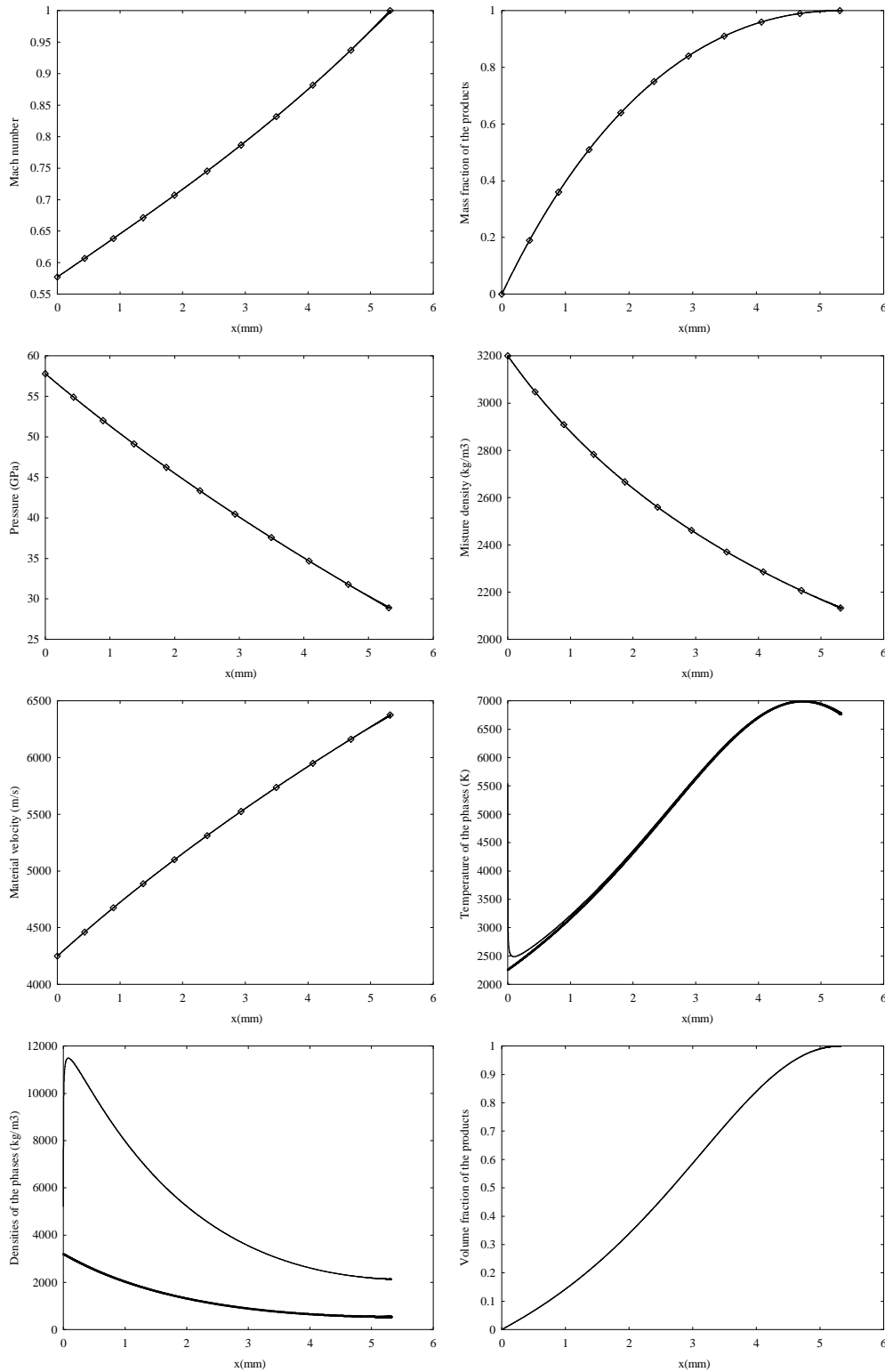


FIG. 8 – Comparaison des variables de l'écoulement entre le front de choc et la surface sonique pour une détonation stable multiphasique dans la limite monophasique avec un échange de chaleur pris égal à $H = 10^{13}$ W/K. La solution numérique est représentée en traits continus et la solution exacte, donnée dans Fickett et Davis (1979), est représentée en symboles.

La cinétique réactionnelle est gardée identique et le coefficient d'échange de chaleur H est pris constant et égal à zéro.

Les profils des variables de l'écoulement sont représentés sur la figure 9. La solution de référence de Fickett et Davis est aussi représentée pour évaluer les changements de comportement par rapport aux cas précédents.

Signalons tout d'abord que la vitesse de détonation obtenue par la simulation numérique est de 8 500 m/s, comme dans le cas monophasique. Ceci est tout à fait normal puisque l'équation d'état des produits n'a pas changé, ainsi que l'énergie de réaction. Par contre, les variables de l'écoulement, en tout point ont changé, y compris la longueur de la zone de réaction. Ceci n'a rien de surprenant. Examinons maintenant les effets des échanges de chaleur.

5.3.4 Test 4 : mélange de deux gaz parfaits avec échange de chaleur

Par rapport au cas précédent, on ajoute maintenant les effets des échanges de chaleur. Les paramètres de la simulation sont

$$\begin{aligned} \gamma_1 &= 3, & \gamma_2 &= 4, \\ P_{\infty 1} &= 0 \text{ Pa}, & P_{\infty 2} &= 0 \text{ Pa}, \\ C_{v_1} &= 1\,000 \text{ J/kg/K}, & C_{v_2} &= 4\,000 \text{ J/kg/K}, \\ \rho_{0_1} &= 1\,600 \text{ kg/m}^3, & \rho_{0_2} &= 1\,600 \text{ kg/m}^3, \\ e_{0_1} &= -4.5156 \text{ MJ/kg}, & e_{0_2} &= 0 \text{ MJ/kg}. \end{aligned}$$

La cinétique réactionnelle est gardée identique mais le coefficient d'échange de chaleur H est maintenant non nul

$$H = 10^{13} \text{ W/K}.$$

Les profils des variables de l'écoulement sont représentés sur les figures 10-11. La solution de référence de Fickett et Davis est aussi représentée pour évaluer les changements de comportement par rapport aux cas précédents. Pour faciliter la comparaison, on a aussi conservé sur la colonne de gauche les résultats sans transfert de chaleur, et ajouté sur la colonne de droite les présents résultats avec transfert de chaleur.

Signalons tout d'abord que la vitesse de détonation obtenue par la simulation numérique est maintenant de 8 913 m/s, c'est à dire supérieure à la vitesse de détonation idéale!

Nous n'avons pour l'instant pas d'explication théorique à ce comportement. Une explication pourrait être liée au comportement non monotone de la vitesse du son par rapport à la fraction volumique, mais ceci reste à confirmer.

On observe aussi que la pression et la vitesse ont des niveaux moyens supérieurs à ceux du cas où les échanges de chaleur sont absents. L'inverse est observé pour la masse volumique du mélange. Les températures des phases n'atteignent pas l'équilibre, ce qui est normal, sinon la condition CJ serait retrouvée. Un comportement analogue aux détonations non idéales est observé pour les autres variables : diminution de la distance choc-surface sonique et diminution de la fraction massique sur la surface sonique.

Afin de s'assurer de ces évolutions, et de s'approcher de situations plus réalistes, on va maintenant considérer que le réactif est un matériau condensé, régi par une équation d'état appropriée.

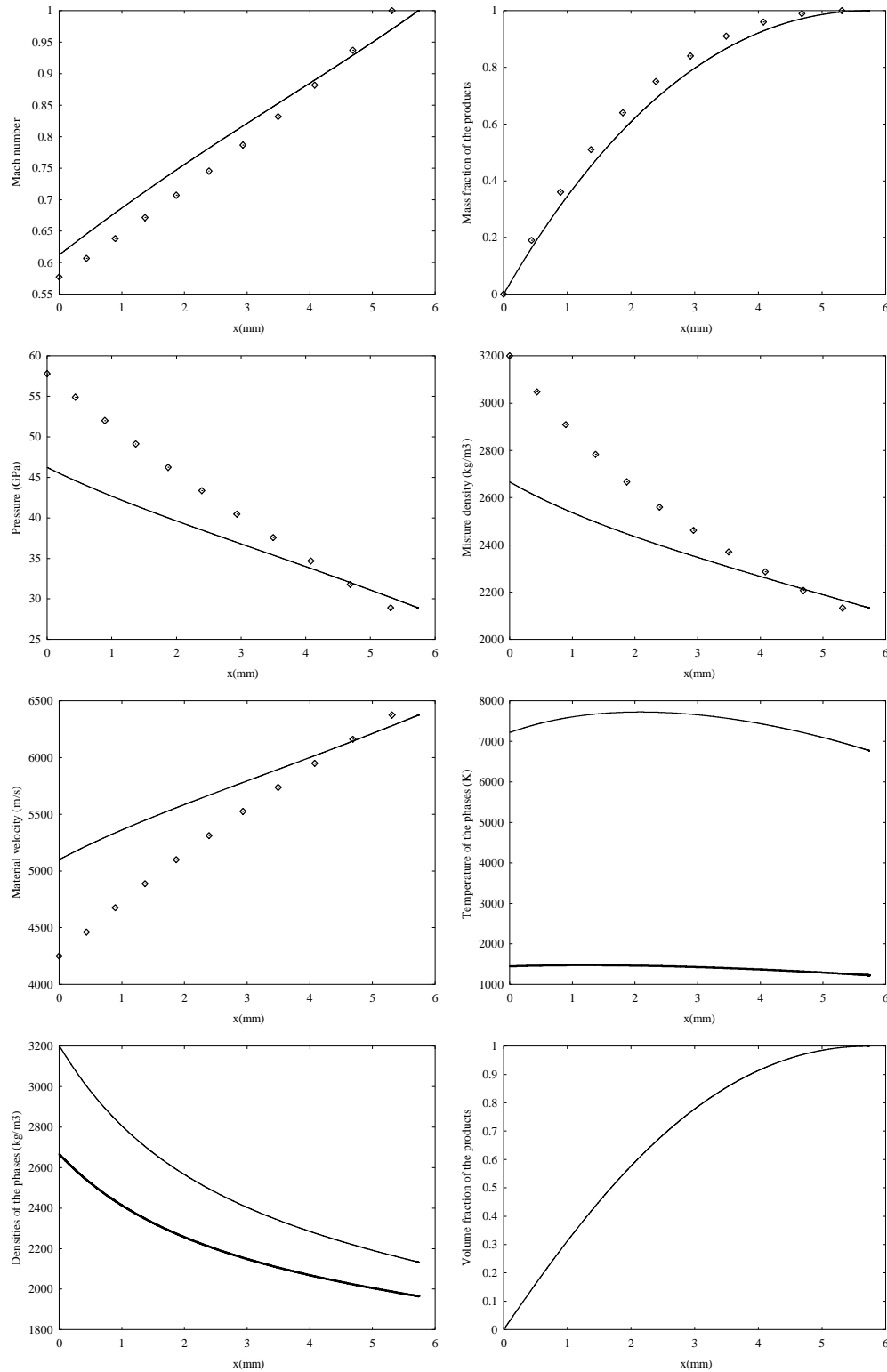


FIG. 9 – Évolution des variables de l'écoulement entre le front de choc et la surface sonique pour une détonation stable multiphasique dans le cas diphasique sans échange de chaleur. La solution numérique est représentée en traits continus et la solution exacte monophasique, donnée dans Fickett et Davis (1979), est représentée en symboles.

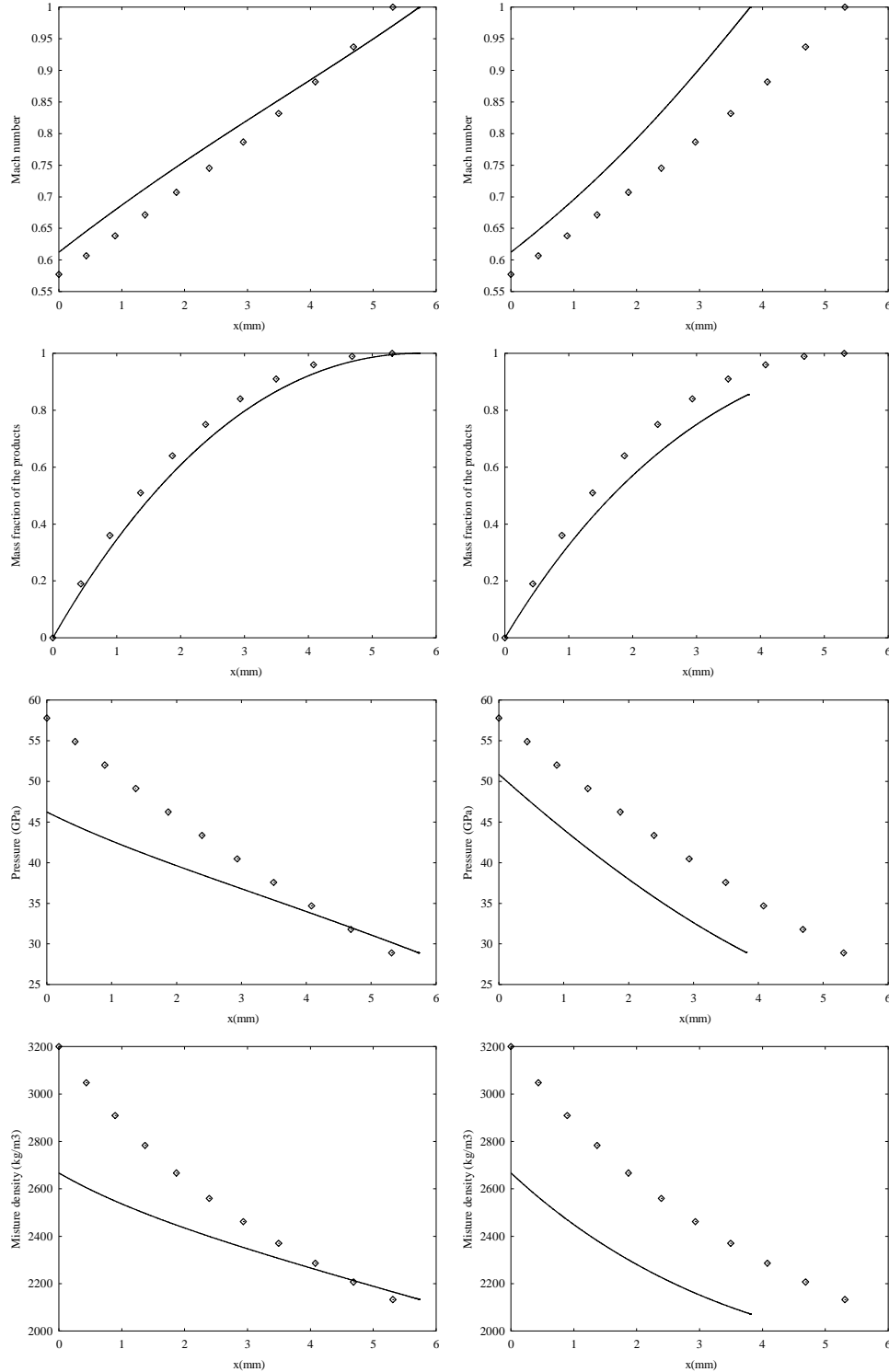


FIG. 10 – Comparaison de évolutions des variables de l'écoulement entre le front de choc et la surface sonique pour une détonation stable multiphasique dans le cas diphasique sans échange de chaleur (colonne de gauche) et dans le cas diphasique en présence d'échange de chaleur (colonne de droite). La solution numérique (nombre de Mach $M = \bar{u}/c$, fraction massique des produits Y_p , pression du mélange P et masse volumique du mélange ρ) est représentée en traits continus et la solution exacte monophasique, donnée dans Fickett et Davis (1979), est représentée en symboles.

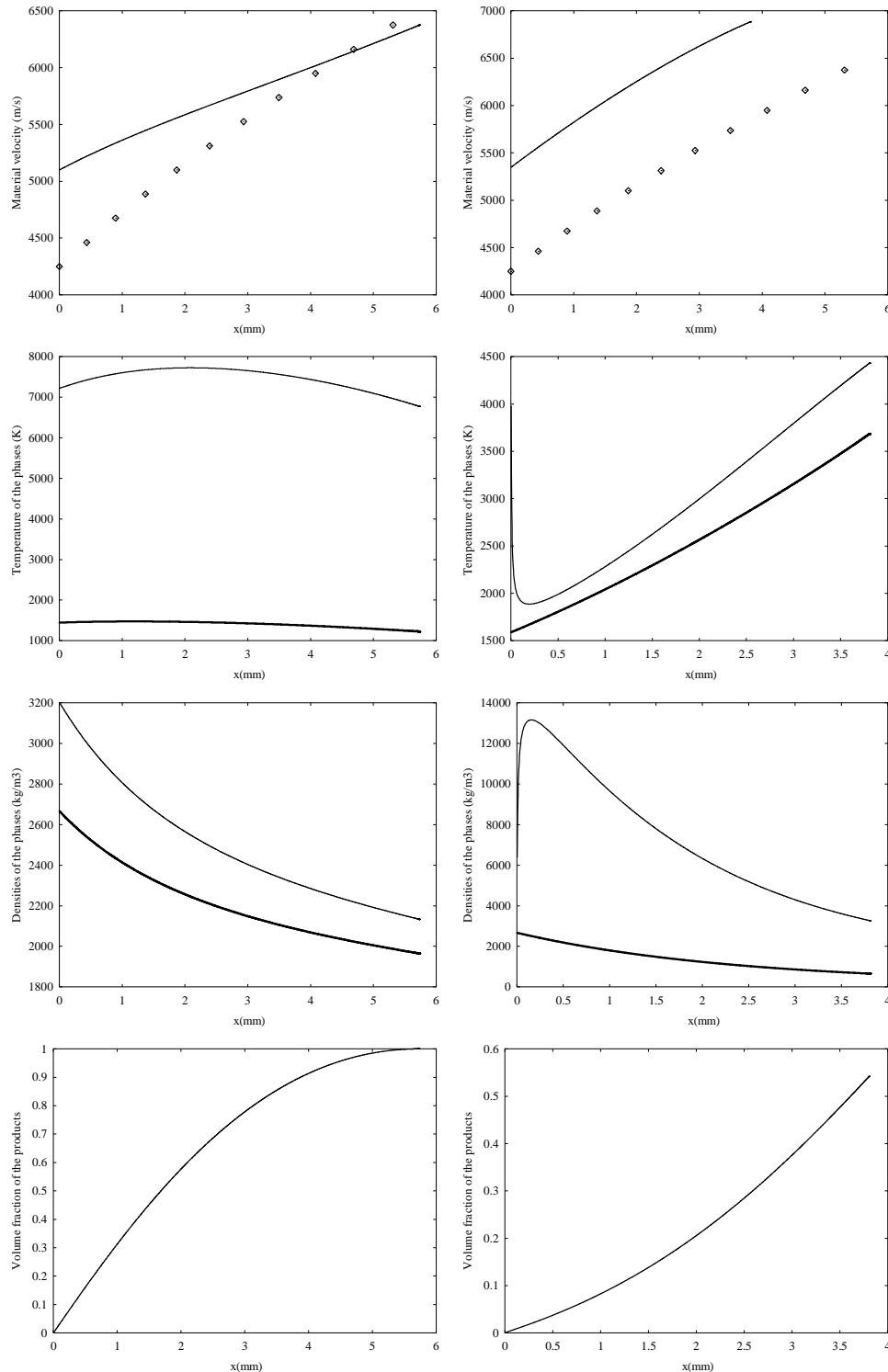


FIG. 11 – Comparaison de évolutions des variables de l'écoulement entre le front de choc et la surface sonique pour une détonation stable multiphasique dans le cas diphasique sans échange de chaleur (colonne de gauche) et dans le cas diphasique en présence d'échange de chaleur (colonne de droite). La solution numérique (vitesse du mélange \bar{u} , température T_k , masse volumique ρ_k et fraction volumique Y_k , pour chacune des phases $k = 1, 2$) est représentée en traits continus et la solution exacte monophasique, donnée dans Fickett et Davis (1979), est représentée en symboles.

5.3.5 Test 6 : mélange d'un gaz parfait et d'un matériau régi par l'équation d'état des gaz raides. Simulations avec et sans échange de chaleur

Par rapport aux simulations précédentes, on rajoute maintenant un potentiel attractif dans l'équation d'état des réactifs. Les paramètres de la simulation sont les suivants

$$\begin{aligned}\gamma_1 &= 3, & \gamma_2 &= 4, \\ P_{\infty 1} &= 0 \text{ Pa}, & P_{\infty 2} &= 10^9 \text{ Pa}, \\ C_{v_1} &= 1\,000 \text{ J/kg/K}, & C_{v_2} &= 4\,000 \text{ J/kg/K}, \\ \rho_{0_1} &= 1\,600 \text{ kg/m}^3, & \rho_{0_2} &= 1\,600 \text{ kg/m}^3.\end{aligned}$$

À ce stade, il faut prendre garde à la définition des énergies de formation des réactifs et des produits. En effet, on veut comparer l'importance des effets de gaz réel par rapport aux simulations précédentes, à énergie de réaction constante. Par exemple, on tient à retrouver le même état CJ lorsque les échanges de chaleur sont absents.

Le point CJ est justement déterminé à partir de la conservation de l'énergie

$$e_p - e_r + \frac{P_p + P_r}{2} (\nu_p - \nu_r) = 0,$$

où l'indice p désigne les produits en fin de réaction et l'indice r celui des réactifs avant le passage du choc. En utilisant l'équation d'état des gaz raides, on obtient

$$\frac{(P_{\text{CJ}} + \gamma_1 P_{\infty 1}) \nu_{\text{CJ}}}{\gamma_1 - 1} + e_{0_1} - \frac{(P_0 + \gamma_2 P_{\infty 2}) \nu_0}{\gamma_2 - 1} - e_{0_2} + \frac{P_{\text{CJ}} + P_0}{2} (\nu_{\text{CJ}} - \nu_0) = 0.$$

Comme P_0 est négligeable devant P_{CJ} et $P_{\infty 2}$, cette relation se simplifie en

$$\frac{(P_{\text{CJ}} + \gamma_1 P_{\infty 1}) \nu_{\text{CJ}}}{\gamma_1 - 1} + \frac{P_{\text{CJ}}}{2} (\nu_{\text{CJ}} - \nu_0) = e_{0_2} - e_{0_1} + \frac{\gamma_2 P_{\infty 2} \nu_0}{\gamma_2 - 1}.$$

Lorsque le réactif est aussi un gaz parfait, $P_{\infty 2} = 0$, et l'équation précédente se résume à

$$\frac{(P_{\text{CJ}} + \gamma_1 P_{\infty 1}) \nu_{\text{CJ}}}{\gamma_1 - 1} + \frac{P_{\text{CJ}}}{2} (\nu_{\text{CJ}} - \nu_0) = q = e_{0_2} - e_{0_1}.$$

Mais lorsque le réactif est une phase condensée, l'énergie libérée q correspond à la somme suivante

$$q = e_{0_2} - e_{0_1} + \frac{\gamma_2 P_{\infty 2} \nu_0}{\gamma_2 - 1},$$

qui représente la somme de l'énergie des liaisons moléculaires et des liaisons cristallines.

Pour comparer les résultats par rapport aux simulations précédentes, nous voulons conserver q à la valeur

$$q = 4.5156 \text{ MJ/kg}.$$

On veut aussi, pour des raisons de simplicité garder l'énergie de référence du réactif à zéro

$$e_{0_2} = 0 \text{ MJ/kg}.$$

La valeur de $P_{\infty 2}$ dépend uniquement de la polaire de choc du réactif. Ceci nous conduit à choisir alors l'énergie de référence des produits de la façon suivante

$$e_{0_1} = e_{0_2} - q + \frac{\gamma_2 P_{\infty 2} \nu_0}{\gamma_2 - 1}.$$

Par ailleurs, la cinétique réactionnelle est gardée identique et le coefficient d'échange de chaleur H sera pris soit nul, soit à la valeur constante $H = 10^{13}$ W/K.

Les profils des variables de l'écoulement sont représentés sur les figures 12–13. La solution de référence de Fickett et Davis est aussi représentée pour évaluer les changements de comportement par rapport aux cas précédents. Pour faciliter la comparaison, on a représenté sur la colonne de gauche les résultats sans transfert de chaleur et ceux avec transfert de chaleur sur la colonne de droite.

La vitesse de détonation obtenue par la simulation numérique en absence d'échange de chaleur est égale à 8 500 m/s, comme précédemment. Avec échange de chaleur, elle est maintenant de 8 705 m/s, c'est à dire toujours supérieure à la vitesse de détonation idéale, mais de façon moindre.

Quelques écarts mineurs apparaissent entre les présentes simulations et celles où les deux phases sont gouvernées par l'équation d'état du gaz parfait, mais les évolutions qualitatives et les commentaires précédents demeurent.

5.3.6 Test 7 : mélange d'un gaz parfait et d'un matériau régi par l'équation d'état des gaz raides en présence d'effets de courbure du front et de transferts de chaleur

On reprend les mêmes paramètres de simulation que précédemment, en présence de transferts de chaleur et en faisant varier le rayon de courbure du choc entre 1 cm et 1 m par pas de 1 cm. Pour mémoire, on a laissé figurer le profil exact de la détonation idéale monophasique, correspondant à un rayon de courbure infini. Ces résultats sont donnés dans la figure 14.

Ces simulations sont associées à un résultat complémentaire, relatifs à la relation célérité–courbure de l'explosif, comme représenté sur la figure 15. Pour mémoire, on a représenté à gauche la relation célérité courbure de l'explosif obtenue dans le cas monophasique, tandis que celle obtenue dans le cas diphasique est représentée à droite.

Il est surprenant de remarquer que malgré les différences sensibles observées dans la zone de réaction entre le modèle monophasique et le modèle diphasique, peu de différences sont observées sur la relation célérité - courbure. En particulier, l'allure est la même, à une translation près.

Par ailleurs, il est intéressant de remarquer que la relation célérité–courbure de l'explosif peut être déterminée par la présente méthode. Ce résultat est obtenu à partir d'une cinétique de décomposition donnée. On peut alors songer à déterminer cette cinétique par une méthode inverse, à partir de la connaissance expérimentale de la relation célérité–courbure [9].

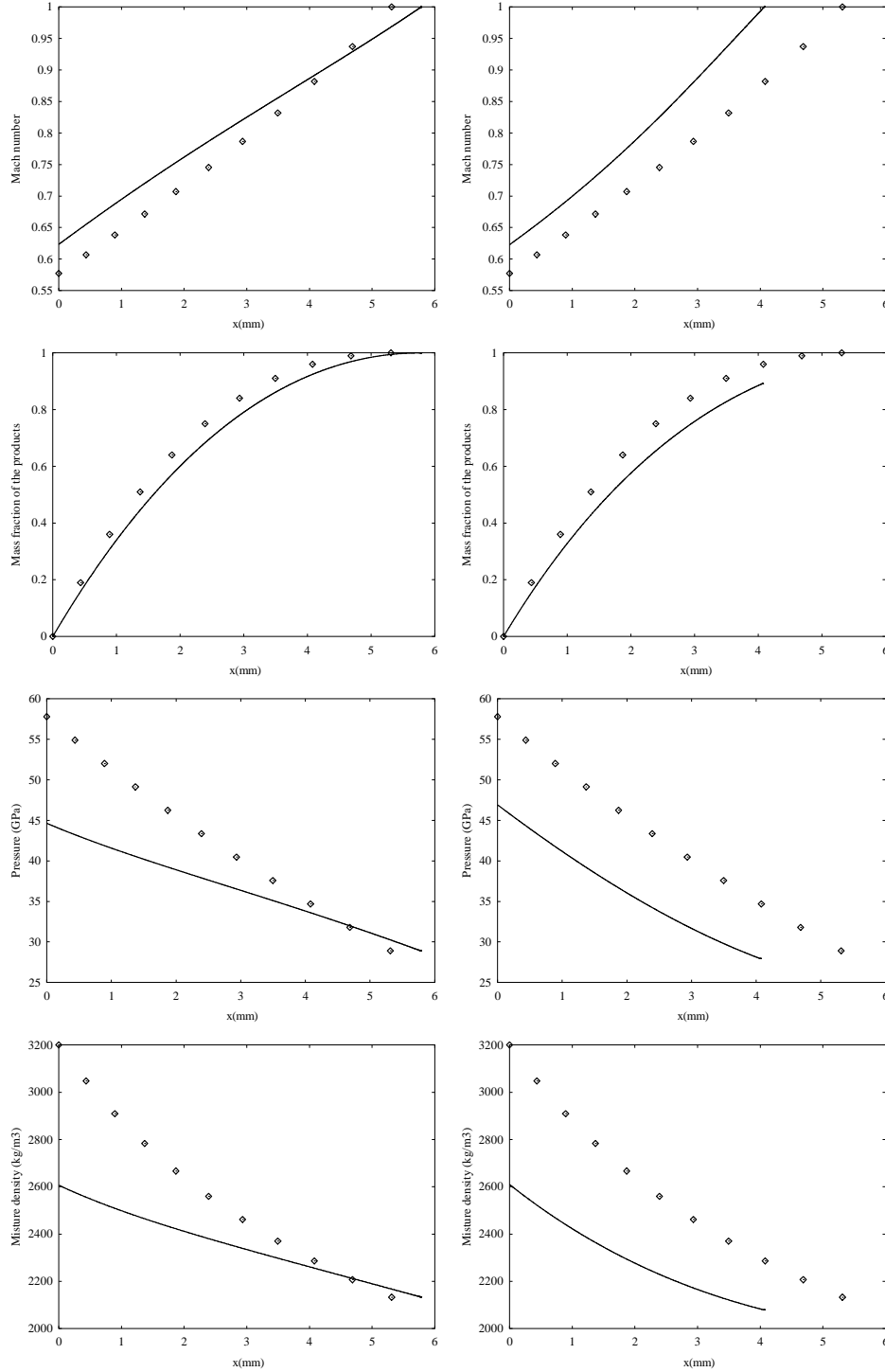


FIG. 12 – Comparaison de l'évolution des variables de l'écoulement entre le front de choc et la surface sonique pour une détonation stable multiphasique dans le cas diphasique sans échange de chaleur (colonne de gauche) et dans le cas diphasique en présence d'échange de chaleur (colonne de droite). Les produits sont régis par l'équation d'état des gaz parfaits tandis que le réactif est régi par l'équation d'état des gaz raides. La solution numérique (nombre de Mach $M = \bar{u}/c$, fraction massique des produits Y_p , pression du mélange P et masse volumique du mélange ρ) est représentée en traits continus et la solution exacte monophasique, donnée dans Fickett et Davis (1979), est représentée en symboles.

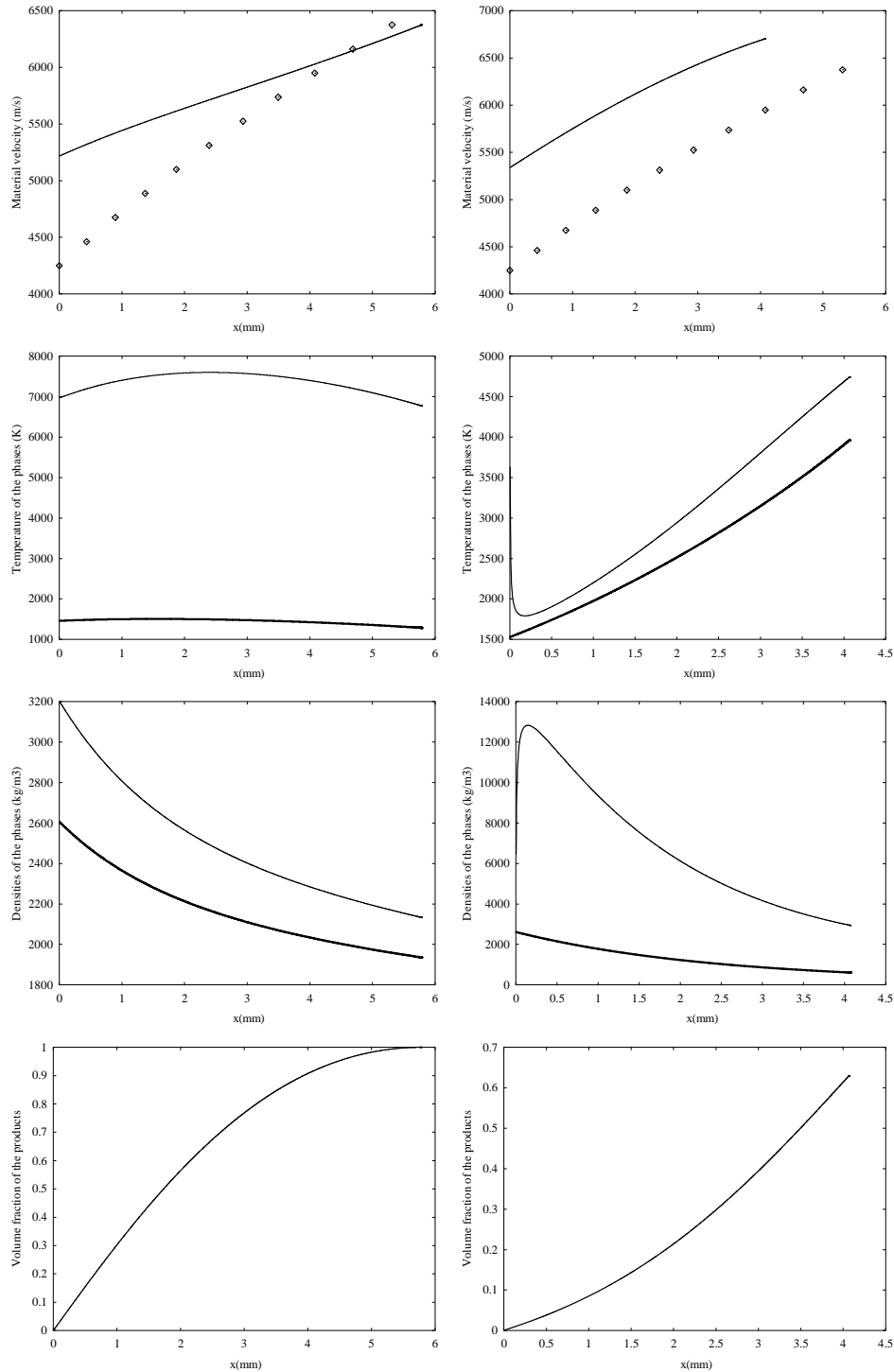


FIG. 13 – Comparaison de l'évolution des variables de l'écoulement entre le front de choc et la surface sonique pour une détonation stable multiphasique dans le cas diphasique sans échange de chaleur (colonne de gauche) et dans le cas diphasique en présence d'échange de chaleur (colonne de droite). Les produits sont régis par l'équation d'état des gaz parfaits tandis que le réactif est régi par l'équation d'état des gaz raides. La solution numérique (vitesse matérielle du mélange \bar{u} , température T_k , masse volumique ρ_k , pour chaque phase $k = 1, 2$ et fraction volumique Y_1 de la phase 1) est représentée en traits continus et la solution exacte monophasique, donnée dans Fickett et Davis (1979), est représentée en symboles.

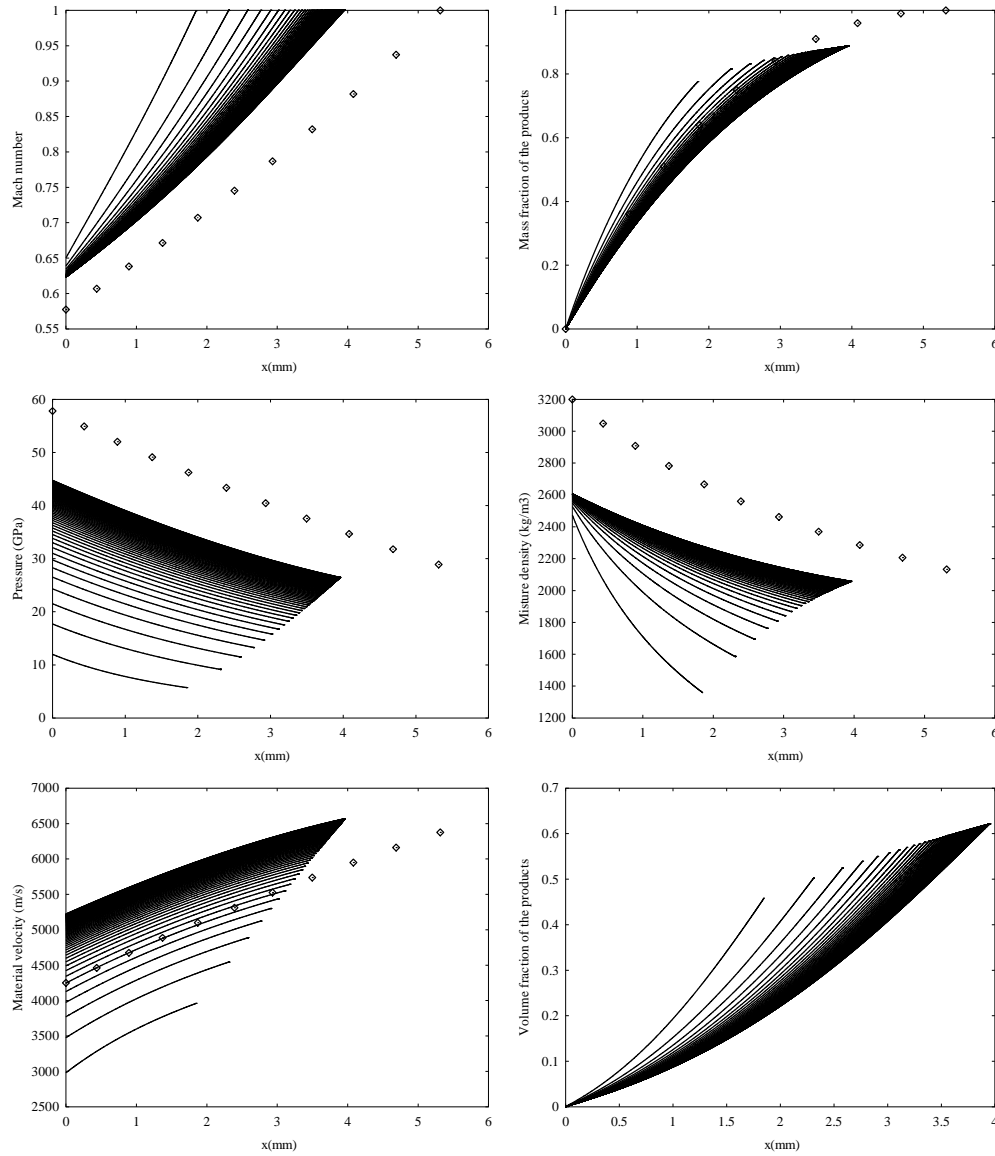


FIG. 14 – Évolution des variables de l'écoulement entre le front de choc et la surface sonique pour des détonations multiphasiques à front courbé. Le rayon de courbure varie entre 1 cm et 1 m par pas de 1 cm. Les solutions numériques (nombre de Mach $M = \bar{u}/c$, fraction massique des produits Y_p , pression du mélange P , masse volumique du mélange ρ , vitesse matérielle du mélange \bar{u} et fraction volumique de la phase 1 Y_1) sont représentées en traits continus, et la solution exacte monophasique dans le cas d'un rayon de courbure infini est représentée en symboles.

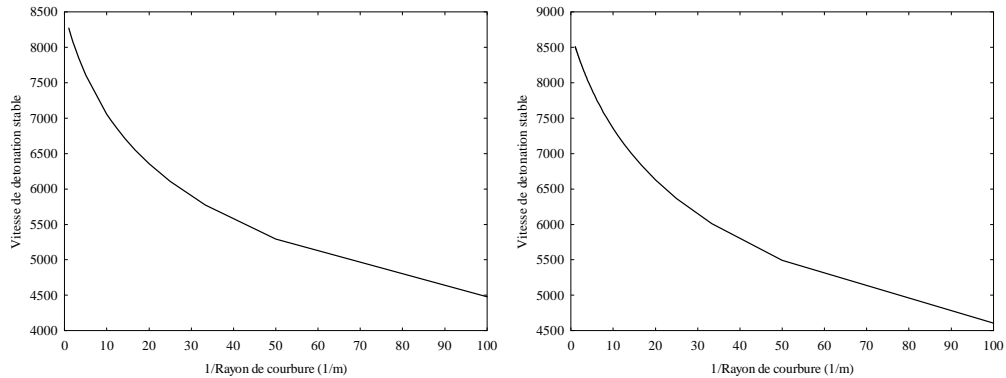


FIG. 15 – Relation célérité - courbure théorique de l'explosif étudié. Cas monophasique à gauche, cas diphasique à droite.

6 Conclusion

Le modèle semble fournir un comportement de solution correct, en accord avec les nouvelles conditions de stabilité des détonations qui ont été obtenues. Le code de calcul est stable, précis et rapide. Les calculs qui ont été effectués sur le test 7, pour 100 rayons de courbure successifs, ont été réalisés sur un PC en environ 5 mn.

Il reste à approfondir :

- l'introduction de lois d'état plus générales pour les produits de détonation, comme pour les phases condensées;
- l'analyse des conditions de stabilité des détonations multiphasiques en présence de transfert de chaleur. Nous avons vu que les simulations pouvaient prédire des vitesses de détonation supérieures à la vitesse CJ, ce qui demande de plus profondes investigations.

Références

- [1] D.L. Chapman, *On the rate of explosion in gases*, Philos. Mag., Vol. 47, pp. 90–104, 1899.
- [2] A. Chinnayya, E. Daniel and R. Saurel, *Modelling detonation waves in heterogeneous energetic materials*, Journal of Computational Physics, Vol. 196, 2, 2004.
- [3] W. Doering, *On detonation processes in gases*, Ann. Phys., 43, pp. 421–436, 1943.
- [4] A. V. Fedorov, T. A. Khmel and V.M. Formin, *Non equilibrium model of steady detonations in aluminium particles - oxygen suspensions*, Shock Waves, Vol. 9, Nr. 5, pp. 313–318, 1999.
- [5] W. Fickett & W. C. Davis, *Detonation*, University of California Press - Berkeley-Los Angeles-London, 1979.
- [6] H. Guenoche, P. Le Diuzet and C. Sedes, *Influence of the heat-release function on the detonation states*, AIAA Progress in Astronautics and Aeronautics, Vol. 75, pp. 387–407, 1981.
- [7] A. Murrone, H. Guillard, *A five equation reduced model for compressible two phase flow problems*, Journal of Computational Physics, Vol. 202, pp. 664–698, 2004.
- [8] E. Jouguet, *Mécanique des explosifs*, Paris: Octave Doin et fils, 1917.
- [9] D. L. Kennedy and D. A. Jones, *Modelling shock initiation and detonation in the non ideal explosive PBXW-115*, 10th International Symposium on Detonation, Boston, 1993.
- [10] J. von Neumann, *Progress Report on "Theory of Detonation Waves"*, OSRD Report 549, 1942.
- [11] J. von Neumann, *Theory of detonation waves*, in John von Neumann, collected works, Vol. 6, ed. A. J. Taub. New York: Macmillan, 1942.
- [12] R. Saurel, O. Le Metayer, J. Massoni and S. Gavrilyuk, *Shock jump relations for multiphase mixtures with stiff mechanical relaxation*, submitted to Shock Waves, 2005. Manuscrit disponible sur <http://iusti.polytech.univ-mrs.fr/IUSTI/Equipes/M3h/publications/RHshock.pdf>
- [13] W. W. Wood and J. G. Kirkwood, *Diameter effect in condensed explosives. The relationship between velocity and radius of curvature of the detonation wave*, Journal of Chemical Physics, Vol. 22, pp. 1920–1924, 1954.
- [14] Ya. B. Zeldovich, *On the theory of the propagation of detonation in gaseous systems*, Eksp. Teor. Fiz., 10, pp.542–568, 1940, (English translation: NACA TM 1261. 1960).

A Détermination de la solution analytique pour le cas 1-D plan, monophasique

Cette détermination est effectuée ici dans le cas particulier où le fluide obéit à la loi des gaz parfaits. On rappelle que ce résultat est bien connu [10, 11] ou [5], mais non explicité dans la forme que nous donnons ici. Les enseignements apportés lors de cette détermination permettent d'améliorer l'algorithme numérique.

On rappelle que la détermination de l'onde s'effectue à l'aide de la donnée de l'état du fluide en aval de cette onde (variables indexée en bas par "0"), des relations de saut au travers du choc (4) et de la résolution du système différentiel, dans le repère de l'onde (5).

On suppose l'état à droite du front (indexé par "0") connu, avec

$$\begin{aligned} (Y_P)_0 &= 0, \\ u_0 &= 0. \end{aligned}$$

L'on en déduit les relations suivantes (l'état à gauche est indexé par "**")

$$\begin{aligned} (Y_P)_* &= (Y_P)_0 = 0, \\ \bar{m}_* &= \bar{m}_0 = \bar{m} = \rho_* \bar{u}_* = \rho_0 \bar{u}_0, \\ P_* &= P_0 + \bar{m} (\bar{u}_0 - \bar{u}_*), \\ \bar{m} (E_* - E_0) + P_* (\bar{u}_* - \bar{u}_0) &= 0, \end{aligned}$$

où $\bar{m} = \rho \bar{u}$, $\bar{u} = D - \tilde{u}$ et $\tilde{u} = -u$ (ce qui revient à exprimer les relations dans le repère fixe lié au choc avec l'axe de symétrie dirigé vers l'amont du choc).

En utilisant le fait que $(Y_P)_* = (Y_P)_0 = 0$, la définition de l'énergie totale et $u_0 = 0$, la relation de saut sur l'énergie se réécrit

$$\bar{m} (\mathcal{E}_* - \mathcal{E}_0) + \frac{\bar{m}}{2} (\bar{u}_0 - \bar{u}_*)^2 + p_* (\bar{u}_* - \bar{u}_0) = 0.$$

La relation de saut sur la pression permet également d'écrire

$$\frac{\bar{m}}{2} (\bar{u}_* - \bar{u}_0)^2 = \frac{P_0 - P_*}{2} (\bar{u}_* - \bar{u}_0),$$

de sorte qu'on a

$$\bar{m} (\mathcal{E}_* - \mathcal{E}_0) + \frac{P_0 + P_*}{2} (\bar{u}_* - \bar{u}_0) = 0.$$

Comme $\bar{u} = \bar{m} \nu$, avec $\nu = 1/\rho$, volume spécifique la relation sur l'énergie devient

$$(\mathcal{E}_* - \mathcal{E}_0) + \frac{P_* + P_0}{2} (\nu_* - \nu_0) = 0. \quad (27)$$

Comme le fluide est régi par la loi des gaz parfaits $\mathcal{E} = P/[(\gamma - 1)\rho]$, on obtient l'expression suivante pour la pression P_*

$$P_* = \frac{(\gamma + 1)\nu_0 - (\gamma - 1)\nu_*}{(\gamma + 1)\nu_* - (\gamma - 1)\nu_0} P_0. \quad (28)$$

On a donc 4 équations pour 5 inconnues qui sont ρ_* , \bar{u}_* , $\bar{u}_0 = D$ (vitesse du choc de détonation), $(Y_P)_*$ et P_* . Il suffit donc à ce stade de connaître par exemple la pression

P_* pour en déduire toutes les autres variables. En effet, si on suppose que P_* est une autre donnée du problème, la relation (28) permet de déduire le volume spécifique ν_*

$$\nu_* = \frac{(\gamma + 1) P_0 + (\gamma - 1) P_*}{(\gamma - 1) P_0 + (\gamma + 1) P_*} \nu_0, \quad (29)$$

et la masse volumique $\rho_* = 1/\nu_*$. En utilisant le fait que $\bar{u} = \bar{m} \nu$ et en remplaçant dans l'expression $P_* = P_0 + \bar{m} (\bar{u}_0 - \bar{u}_*)$, on obtient, après calculs que

$$\bar{m}^2 = \frac{(\gamma + 1) P_* + (\gamma - 1) P_0}{2 \nu_0} = \frac{(\gamma + 1) P_* + (\gamma - 1) P_0}{2} \rho_0. \quad (30)$$

On en déduit la vitesse $(\bar{u}_*)^2 = \bar{m}^2 \nu_*^2$

$$(\bar{u}_*)^2 = \frac{[(\gamma + 1) P_0 + (\gamma - 1) P_*]^2}{2 \rho_0 [(\gamma + 1) P_* + (\gamma - 1) P_0]} = \frac{[(\gamma + 1) P_0 + (\gamma - 1) P_*]}{2} \nu_*. \quad (31)$$

On va montrer que l'on peut en fait déterminer complètement ces variables dans le cas particulier où l'équation d'état est celle des gaz parfaits, sans pour cela avoir d'autres données que l'état aval du front.

Dans le repère lié au choc, où la direction est prise en sens inverse du sens de l'écoulement, et l'origine du repère au point du choc, les équations gardent la même structure (invariance) mais sont stationnaires, le système obtenu est alors un système différentiel qui s'écrit

$$\begin{cases} \frac{dY_P}{d\bar{x}} &= \frac{\dot{Y}_P}{\bar{u}}, \\ \frac{d(\rho \bar{u})}{d\bar{x}} &= 0, \\ \frac{d(P + \rho \bar{u}^2)}{d\bar{x}} &= 0, \\ \bar{u} \frac{de}{d\bar{x}} + \frac{P}{\rho} \frac{d\bar{u}}{d\bar{x}} &= 0, \end{cases} \quad (32)$$

où l'on a noté

$$\begin{aligned} e &= e(P, \rho, Y_P), \\ &= \mathcal{E}(P, \rho) + Y_P e_P^0 + (1 - Y_P) e_R^0, \\ &= \mathcal{E}(P, \rho) + e_R^0 - q Y_P, \end{aligned}$$

où $q = e_R^0 - e_P^0 > 0$, car la réaction est exothermique. On a montré que l'équation portant sur l'énergie était équivalente à

$$(c^2 - \bar{u}^2) \frac{d\bar{u}}{d\bar{x}} = \frac{q \dot{Y}_P}{\rho \left. \frac{\partial e}{\partial P} \right|_{\rho, Y_P}}.$$

Le système (32) se réécrit sous la forme équivalente suivante

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dY_P}{d\bar{x}} = \frac{\dot{Y}_P}{\bar{u}}, \\ \frac{d(\bar{m})}{d\bar{x}} = 0, \\ \frac{dP}{d\bar{x}} = -\bar{m} \frac{d\bar{u}}{d\bar{x}}, \\ (c^2 - \bar{u}^2) \frac{d\bar{u}}{d\bar{x}} = \frac{q \dot{Y}_P}{\rho \left. \frac{\partial e}{\partial P} \right|_{\rho, Y_P}}. \end{array} \right. \quad (33)$$

Nous pouvons dès lors faire quelques remarques sur ce système :

Remarque A.1 Pour des raisons de stabilité thermodynamique, $\left. \frac{\partial e}{\partial P} \right|_{\rho, Y_P} > 0$, et dans le cas de l'équation d'état modèle des gaz parfaits, $\left. \frac{\partial e}{\partial P} \right|_{\rho, Y_P} = \frac{1}{(\gamma-1)\rho}$. On sait par ailleurs que $\dot{Y}_P \geq 0$, et plus précisément que $\dot{Y}_P > 0$ partout sauf au point sonique, point CJ (dit de Chapman-Jouguet), pour lequel $\dot{Y}_P = 0$. L'on sait aussi qu'en amont du front de détonation, et dans le référentiel lié à cette onde, la vitesse du fluide est subsonique $\bar{u} < c$ et est positive $\bar{u} > 0$. Par ces hypothèses et la forme des équations, on en déduit que

- \bar{u} est une fonction croissante de \bar{x} , sa valeur minimale est obtenue au point amont du front et maximale au point sonique où $\bar{u} = c$.
- P est une fonction décroissante de \bar{x} , elle atteint son maximum en amont du front et son minimum en fin de zone de réaction, i.e. au point sonique.
- Y_P est une fonction croissante de \bar{x} , elle atteint son minimum en amont du front $Y_P = 0$ et son maximum au point sonique $Y_P = 1$.
- \bar{m} est constant dans toute la zone de réaction, y compris au passage de l'onde de détonation, et est strictement positive, et comme $\rho = \bar{m}/\bar{u}$, ρ est une fonction décroissante de \bar{x} , atteint son maximum en amont du front et son minimum au point sonique.

Remarque A.2 La condition $c^2 - \bar{u}^2 = 0$ est équivalente à écrire que $\dot{Y}_P = 0$, elle même équivalente à écrire que $Y_P = 1$. C'est la relation de Chapman-Jouguet : le point de fin de réaction coïncide avec le point sonique.

Grâce à ces hypothèses et ces remarques, on en déduit la proposition suivante :

Proposition A.3 Pour un état aval donné d'un fluide monophasique dont le mélange obéit à une loi des gaz parfaits, il existe une et une seule solution du système (33), avec comme donnée initiale, l'état aval du front de détonation. Si l'on note par l'indice "f" les variables au point sonique, par "0" les variables au point aval du front et par "*"

les variables au point amont du front, on a les relations suivantes

$$\begin{aligned}
P_f &= \frac{P_* + P_0}{2}, \\
\rho_f &= \rho_0 \frac{[(\gamma + 1) P_* + (\gamma - 1) P_0]}{\gamma (P_* + P_0)}, \\
\bar{u}_f &= c_f = \frac{\bar{m}}{\rho_f}, \\
\bar{m} &= \left[\frac{[(\gamma + 1) P_* + (\gamma - 1) P_0]}{2} \rho_0 \right]^{\frac{1}{2}}, \\
D &= \bar{u}_0 = \frac{\bar{m}}{\rho_0}, \\
P_* &= P_0 + 2(\gamma - 1) \rho_0 q + \sqrt{\Delta_P}, \\
\Delta_P &= 4(\gamma - 1) \rho_0 q \left[2 \frac{\gamma}{\gamma + 1} P_0 + (\gamma - 1) \rho_0 q \right].
\end{aligned} \tag{34}$$

Preuve A.4 Il est facile de voir, dans le cas d'une équation d'état de type gaz parfait, que

$$\begin{aligned}
\rho (c^2 - \bar{u}^2) d\bar{u} &= \frac{q \dot{Y}_P}{\left. \frac{\partial e}{\partial P} \right|_{\rho, Y_P}} d\bar{x} = q \left. \frac{\partial P}{\partial e} \right|_{\rho, Y_P} \bar{u} dY_P \\
&= (\gamma - 1) \bar{m} q dY_P.
\end{aligned}$$

Mais en observant que

$$\rho (c^2 - \bar{u}^2) d\bar{u} = d(\bar{m} (c^2 - \bar{u}^2)) - \bar{u} d(\rho (c^2 - \bar{u}^2))$$

et en utilisant d'une part la relation $d\rho = -\frac{\rho}{\bar{u}} d\bar{u}$, d'autre part le fait que $c^2 = \frac{\gamma P}{\rho}$, on montre, après calculs, que

$$d(c^2 - \bar{u}) = \left(\frac{c^2}{\bar{u}} - (\gamma + 2) \bar{u} \right) d\bar{u},$$

et que

$$d(\rho (c^2 - \bar{u}^2)) = -\bar{m} (\gamma + 1) d\bar{u},$$

ce qui permet de déduire que

$$\rho (c^2 - \bar{u}^2) d\bar{u} = d[\bar{m} (c^2 - \bar{u}^2)] + (\gamma + 1) \bar{m} \bar{u} d\bar{u} = \bar{m} d \left[c^2 + \frac{\gamma - 1}{2} \bar{u} \right],$$

et comme $\rho (c^2 - \bar{u}^2) d\bar{u} = \bar{m} d[(\gamma - 1) q Y_P]$, on en déduit que

$$d \left[c^2 + \frac{(\gamma - 1)}{2} \bar{u}^2 - (\gamma - 1) q Y_P \right] = 0. \tag{35}$$

Cette relation étant vraie dans toute la zone de réaction, on a en particulier $((Y_P)_f = 1$ et $(Y_P)_* = 0$)

$$(c_f)^2 + \frac{(\gamma - 1)}{2} (\bar{u}_f)^2 - (\gamma - 1) q = (c_*)^2 + \frac{(\gamma - 1)}{2} (\bar{u}_*)^2. \tag{36}$$

La troisième équation du système permet d'écrire que

$$P_f + \bar{m} \bar{u}_f = P_* + \bar{m} \bar{u}_* .$$

Dans le cas particulier d'un gaz parfait, on observe que

$$\bar{u}_f = c_f \Leftrightarrow (\bar{u}_f)^2 = (c_f)^2 = \frac{\gamma P_f}{\bar{m}} \bar{u}_f \Leftrightarrow \bar{u}_f = \frac{\gamma P_f}{\bar{m}}$$

de sorte que

$$P_f = P_* + \bar{m} \left(\bar{u}_* - \frac{\gamma P_f}{\bar{m}} \right) ,$$

et donc

$$P_f = \frac{P_* + \bar{m} \bar{u}_*}{(\gamma + 1)} .$$

Comme on connaît toutes les expressions de l'état amont du front en fonction de P_* , cela permet d'écrire que

$$\bar{m} \bar{u}_* = \frac{(\gamma + 1) P_0 + (\gamma - 1) P_*}{2} .$$

En remplaçant cette expression dans celle de P_f , on déduit

$$P_f = \frac{P_* + P_0}{2} .$$

et donc les autres variables \bar{u}_f et ρ_f

$$\begin{aligned} \bar{u}_f &= \bar{u}_* + \frac{P_* - P_0}{2 \bar{m}} \\ &= c_f = \frac{\gamma (P_* + P_0)}{[2 \rho_0 \{(\gamma + 1) P_* + (\gamma - 1) P_0\}]^{\frac{1}{2}}} , \\ \rho_f &= \frac{\bar{m}}{\bar{u}_f} = \frac{(\gamma + 1) P_* + (\gamma - 1) P_0}{\gamma (P_* + P_0)} \rho_0 . \end{aligned}$$

Revenons de nouveau à la relation d'invariance (36). En remplaçant les différentes expressions par celles données ci-dessus, on aboutit, après calculs, à la relation suivante portant sur P_*

$$(P_*)^2 - 2 [P_0 + 2 (\gamma - 1) \rho_0 q] P_* + P_0 \left[P_0 - \frac{4(\gamma - 1)^2}{\gamma + 1} \rho_0 q \right] = 0 , \quad (37)$$

qui est une équation du second degré en la variable P_* , de discriminant réduit (après simplification) défini par

$$\Delta_P = 4(\gamma - 1) \rho_0 q \left[\frac{2\gamma}{\gamma + 1} P_0 + (\gamma - 1) \rho_0 q \right] > 0 .$$

On a donc deux solutions positives possibles, mais la seule admissible est la plus grande des deux racines et donc

$$P_* = P_0 + 2(\gamma - 1) \rho_0 q + \sqrt{\Delta_P} . \quad (38)$$

Les autres variables s'en déduisent alors aisément.

Nous pouvons faire les remarques suivantes sur ce résultat.

Remarque A.5 *Dans la théorie de Chapman-Jouguet, on ne s'intéresse pas à ce qui se passe dans la zone de réaction, de sorte que le front de détonation est réduit à un simple choc (d'épaisseur nulle). Dans l'hypothèse où l'on néglige la pression aval P_0 , on retrouve bien les valeurs CJ. En effet, si $P_0 = 0$, on obtient*

$$\begin{aligned} P_f &= 2(\gamma - 1) q \rho_0 = P_{CJ} , \\ \rho_f &= \frac{\gamma + 1}{\gamma} \rho_0 = \rho_{CJ} , \\ (c_f)^2 &= \frac{\gamma P_f}{\rho_f} = 2 \frac{\gamma(\gamma - 1)}{(\gamma + 1)} q = (c_{CJ})^2 , \\ \bar{m}^2 &= \frac{(\gamma + 1) \rho_0 P_*}{2} = 2(\gamma^2 - 1) q \rho_0^2 = D^2 \rho_0^2 , \\ D &= [2(\gamma^2 - 1) q]^2 = D_{CJ} , \end{aligned}$$

On retrouve donc bien toutes les valeurs CJ bien connues.

Remarque A.6 *Il s'agit de discuter sur l'unicité de cette solution. On a vu que, sous les hypothèses de la proposition (A.3), la pression P_* était solution d'une équation du second degré, possédant pourtant deux solutions admissibles. En fait, il s'agit ici de traiter des détonations dites fortes, i.e. pour lesquelles la pression, décroissante dans la zone de réaction, atteint son maximum juste en amont du choc de détonation et pour des ondes de détonations élevées (i.e. $D \gg c$). L'on sait que pour ces ondes de choc, le saut de pression entraîne que la pression amont est supérieure à celle du fluide avant le passage de l'onde, donc de P_0 . Or si l'on regarde l'expression de la seconde racine, notée $P_{*,2}$, on a*

$$P_{*,2} = P_0 + 2(\gamma - 1) \rho_0 q - \sqrt{\Delta_P} < P_0 ,$$

puisque

$$\Delta_P > 2(\gamma - 1) \rho_0 q .$$

Donc $P_{*,2}$ n'est pas une pression admissible pour un choc, ce qui permet de prouver l'unicité de la solution.

On vient de montrer qu'il était possible de déterminer à la fois l'état amont et au point sonique (ici de fin de réaction), ainsi que la vitesse de l'onde de choc, sans autres données que l'état du fluide en aval du front. Qu'en est-il dans la zone de réaction? Dans la zone de réaction, on a montré que le système d'équations à résoudre, attaché au repère de l'onde de détonation, était en fait équivalent au système différentiel suivant

$$\begin{cases} dY_P = \frac{\dot{Y}_P}{\bar{u}} d\bar{x} , \\ d\bar{m} = 0 , \\ d[P + \bar{m} d\bar{u}] = 0 , \\ d\left[c^2 + \frac{\gamma - 1}{2} \bar{u}^2 - (\gamma - 1) q Y_P\right] = 0 . \end{cases} \quad (39)$$

La dernière équation ayant été obtenue dans la preuve de la proposition précédente (35). On a alors la deuxième proposition suivante :

Proposition A.7 *Sous les hypothèses de la proposition (A.3), et pour un taux de réaction de la forme $\dot{Y}_P = \hat{r}_0 \sqrt{1 - Y_P}$, avec \hat{r}_0 constante strictement positive, il existe une et une seule solution analytique du système différentiel (39).*

Preuve A.8 *Considérons le changement de variable suivant*

$$\frac{d\bar{x}}{d\tau} = \bar{u} .$$

alors la première équation du système s'écrit

$$\frac{dY_P}{\sqrt{1 - Y_P}} = \hat{r}_0 d\tau ,$$

qui s'intègre facilement et dont la solution est

$$\begin{aligned} Y_P(\tau) &= 1 - \left(1 - \frac{\hat{r}_0}{2} \tau\right)^2 \\ &= \hat{r}_0 \tau \left(1 - \frac{\hat{r}_0}{4} \tau\right) . \end{aligned} \quad (40)$$

En prenant zéro comme origine à la fois pour \bar{x} et pour τ au front de la détonation et en désignant respectivement par \bar{x}_f et τ_f l'abscisse et le temps de fin de réaction (coïncidant avec le point sonique), on a

$$\begin{aligned} \tau_f &= \frac{2}{\hat{r}_0} , \\ \bar{x}_f &= \int_0^{\tau_f} \bar{u}(\tau) d\tau . \end{aligned} \quad (41)$$

On a déjà montré dans la proposition précédente qu'on savait déterminer la constante \bar{m} , ainsi que l'état initial du fluide (correspondant aux variables définies en amont du front par les relations de choc et situées à l'origine, indicées par "*") mais aussi l'état final (correspondant aux variables définies au point sonique, fin de réaction, indicées par "f"). La troisième équation du système différentiel s'intègre facilement et la solution $P = P(\tau) = P(\bar{x})$ s'écrit (on enlève la dépendance en τ pour alléger l'écriture, mais celle-ci est sous entendu dans tout ce qui suit)

$$P = P_* + \bar{m} (\bar{u}_* - \bar{u}) . \quad (42)$$

La dernière relation du système s'intègre comme suit

$$c^2 + \frac{(\gamma - 1)}{2} \bar{u}^2 - (\gamma - 1) q Y_P = (c_*)^2 + \frac{(\gamma - 1)}{2} (\bar{u}_*)^2 . \quad (43)$$

En remarquant que

$$c^2 = \frac{\gamma P}{\rho} = \frac{\gamma P}{\bar{m}} \bar{u} = \frac{\gamma}{\bar{m}} \bar{u} [P_* + \bar{m} (\bar{u}_* - \bar{u})] ,$$

et en remplaçant cette valeur dans la relation (43), on montre qu'on aboutit à l'équation suivante

$$\frac{\gamma P_*}{\bar{m}} [\bar{u} - \bar{u}_*] - \gamma \bar{u} [\bar{u} - \bar{u}_*] + \frac{(\gamma - 1)}{2} [(\bar{u})^2 - (\bar{u}_*)^2] - (\gamma - 1) q Y_P = 0 . \quad (44)$$

En effectuant le changement de variable $\bar{U} = \bar{u} - \bar{u}_* > 0$ (car \bar{u} est une fonction croissante en τ ou \bar{x} et \bar{u}_* est la valeur minimale de \bar{u} sur $[0, \tau_f]$ ou sur $[0, \bar{x}_f]$), l'équation précédente s'écrit, après calculs,

$$\bar{U} \left[\bar{U} - \frac{2}{(\gamma + 1)} \left\{ \frac{\gamma P_*}{\bar{m}} - \bar{u}_* \right\} \right] + 2 \frac{(\gamma - 1)}{(\gamma + 1)} q Y_P = 0, \quad (45)$$

dont le discriminant réduit s'écrit $\Delta_{\bar{U}} = \frac{1}{(\gamma + 1)^2} \left[\left\{ \frac{\gamma P_*}{\bar{m}} - \bar{u}_* \right\}^2 - 2(\gamma^2 - 1) q Y_P \right]$.

Compte tenu de la proposition (A.3), on peut montrer que $\Delta_{\bar{U}} > 0$. En effet, en utilisant les expressions de \bar{m} et \bar{u}_* , on montre que

$$\Delta_{\bar{U}} = \left(\frac{P_* - P_0}{\bar{m}} \right)^2 - 8 \frac{(\gamma - 1)}{(\gamma + 1)} q Y_P,$$

dont on voit que la dépendance en Y_P est une dépendance décroissante quand Y_P croît de 0 à 1. Donc $\Delta_{\bar{U}}(Y_P) \geq \Delta_{\bar{U}}(1) = 0$, par définition de P_* , qui vérifie l'équation (37). On en déduit que l'équation (45) possède deux solutions, de même signe, notées $\bar{U}_{,1}$ et $\bar{U}_{,2}$

$$\begin{cases} \bar{U}_{,1} = \frac{1}{2} \left[\frac{P_* - P_0}{\bar{m}} - \sqrt{\Delta_{\bar{U}}} \right], \\ \bar{U}_{,2} = \frac{1}{2} \left[\frac{P_* - P_0}{\bar{m}} + \sqrt{\Delta_{\bar{U}}} \right], \end{cases} \quad (46)$$

Ces deux racines sont positives. La seule à retenir est $\bar{U}_{,1}$. En effet, comme $\bar{U} = \bar{u} - \bar{u}_*$, \bar{U} est une fonction croissante de Y_P et seule la première racine garantit cette propriété. En revenant aux notations initiales, on en déduit qu'il existe une et une seule solution $\bar{u} = \bar{u}(\tau) = \bar{u}(\bar{x}) = \bar{u}(Y_P)$

$$\bar{u} = \bar{U}_{,1} + \bar{u}_* = \bar{u}_* + \frac{1}{2} \left[\frac{P_* - P_0}{\bar{m}} - \sqrt{\left(\frac{P_* - P_0}{\bar{m}} \right)^2 - 8 \frac{(\gamma - 1)}{(\gamma + 1)} q Y_P} \right]. \quad (47)$$

Ayant déterminé \bar{u} , on en déduit la valeur de P

$$P = \frac{P_* + P_0}{2} + \frac{\bar{m}}{2} \left[\left(\frac{P_* - P_0}{\bar{m}} \right)^2 - 8 \frac{(\gamma - 1)}{(\gamma + 1)} q Y_P \right]^{\frac{1}{2}}, \quad (48)$$

et celle de ρ

$$\rho = \frac{\bar{m}}{\bar{u}}. \quad (49)$$

Pour τ donné dans l'intervalle $[0, \tau_f]$, on vient donc de montrer qu'il existe une unique solution analytique du système différentiel (39). On sait aussi déterminer la valeur de $\bar{x} = \bar{x}(\tau)$ correspondante, qui est, après calculs

$$\bar{x}(\tau) = \tau \left[\bar{u}_* + \frac{P_* + P_0}{2\bar{m}} - \left[2 \frac{(\gamma - 1)}{(\gamma + 1)} q \right]^{\frac{1}{2}} \left(1 - \frac{\hat{r}_0}{4} t \right) \right], \text{ pour } \tau \in [0, \tau_f], \tau_f = \frac{2}{\hat{r}_0}. \quad (50)$$

Nous pouvons faire les remarques suivantes

Remarque A.9 Pour les valeurs limites $Y_P = 0$ et $Y_P = 1$, on retrouve bien les valeurs aux états limites correspondants, à savoir, la définition de l'état amont du front (variables indicées "*") et celle au point sonique (variables indicées "f"). Plus précisément, et indépendamment de l'intégrabilité de \dot{Y}_P , on sait déterminer exactement les états limites des variables (i.e. en début et fin de la zone de réaction).

Remarque A.10 La dépendance en la variable τ , n'intervient qu'implicitement pour toutes les autres variables autres que la variable Y_P ; en fait, toutes les variables, hormi Y_P , dépendent explicitement de la variable Y_P . Cela signifie en particulier que, lors de l'élaboration d'un algorithme de résolution, il suffit d'avoir un bon schéma d'intégration pour la variable Y_P pour en déduire toutes les autres variables, et plus précisément que les conditions de stabilité sur le pas d'intégration ne portent que sur la variable Y_P .

Dans le cas où Y_P n'est pas directement intégrable, on va, dans ce qui suit proposer un algorithme de résolution global dont la précision, compte tenu de la remarque précédente, sera celle du schéma d'intégration utilisé pour la résolution de Y_P . Il est bien évident que cette démarche n'a pour but que de trouver une solution qui puisse être comparée à la solution approchée que l'on a proposé dans ce rapport, ce formalisme ne pouvant se généraliser aisément au cas multiphasique.

Dans le cadre particulier du modèle ZND, où le front de détonation est plan, et pour une équation d'état du mélange supposée être une équation d'état de type gaz parfait, on connaît a priori les valeurs de Y_P en début et fin de zone de réaction. Il suffit donc de s'imposer a priori les variations sur Y_P dans l'intervalle $[0,1]$, en ayant comme donnée initiale globale, l'état "*" déterminé indépendamment de la forme de la fonction définissant le taux de réaction, pour d'une part trouver le pas $(\Delta\tau)^{k+1} = \tau^{k+1} - \tau^k$, $\tau^0 = 0$, d'autre part en déduire toutes les autres variables \bar{u}^{k+1} , P^{k+1} , ρ^{k+1} et \bar{x}^{k+1} . En effet, donnons-nous un entier $N \gg 1$, et définissons, pour $k = 0, \dots, N-1$

$$(\Delta Y_P)^{k+1} = Y_P^{k+1} - Y_P^k = Y_P(\tau^{k+1}) - Y_P(\tau^k) = \frac{1}{N},$$

alors, l'intégration de l'équation différentielle portant sur Y_P s'écrit

$$Y_P(\tau^{k+1}) - Y_P(\tau^k) = \int_{\tau^k}^{\tau^{k+1}} \hat{r}(Y_P)(\tau) d\tau,$$

où l'on a noté $\hat{r}(\tau) = \dot{Y}_P(\tau)$. Supposons qu'on choisisse le schéma d'intégration suivant

$$\int_{\tau^k}^{\tau^{k+1}} \hat{r}(\tau) d\tau \simeq \langle \dot{Y}_P \rangle_{[\tau^k, \tau^{k+1}]} (\Delta\tau)^{k+1},$$

où $\langle \dot{Y}_P \rangle_{[\tau^k, \tau^{k+1}]}$ est une valeur moyenne de \dot{Y}_P sur $[\tau^k, \tau^{k+1}]$ s'exprimant en fonction des valeurs limites de \dot{Y}_P sur cet intervalle, alors, le schéma d'intégration pour Y_P et la définition du pas d'intégration sont les suivants

$$\begin{cases} Y_P^{k+1} &= Y_P^k + \frac{1}{N}, \\ (\Delta\tau)^{k+1} &= \left[N \langle \dot{Y}_P \rangle_{[\tau^k, \tau^{k+1}]} \right]^{-1}. \end{cases} \quad (51)$$

Il est facile de voir que ce schéma garantit immédiatement l'admissibilité de la solution approchée Y_P^{k+1} , ainsi que sa croissance en la variable τ , i.e.

$$0 \leq Y_P^k < Y_P^{k+1} \leq 1.$$

Dès lors, et compte tenu des remarques et de la preuve de la proposition (A.7), on sait alors parfaitement déterminer toutes les autres variables en $\tau = \tau^{k+1}$

$$\begin{cases} \bar{u}^{k+1} &= \bar{u}_* + \frac{P_* - P_0}{2\bar{m}} - \frac{1}{2} \left[\left(\frac{P_* - P_0}{\bar{m}} \right)^2 - 8 \frac{(\gamma - 1)}{(\gamma + 1)} q Y_P^{k+1} \right]^{\frac{1}{2}}, \\ P^{k+1} &= \frac{P_* + P_0}{2} + \frac{\bar{m}}{2} \left[\left(\frac{P_* - P_0}{\bar{m}} \right)^2 - 8 \frac{(\gamma - 1)}{(\gamma + 1)} q Y_P^{k+1} \right]^{\frac{1}{2}}, \\ \rho^{k+1} &= \frac{\bar{m}}{\bar{u}^{k+1}}, \end{cases} \quad (52)$$

avec, comme donnée initiale, pour $k = 0$, la valeur de l'état amont "*" au front de détonation, et pour $k = 0, \dots, N - 1$.

Reste maintenant à discuter de la précision du schéma et de la détermination du pas d'espace pour définir notamment le point sonique correspondant dans ce modèle ZND au point de fin de réaction. Ayant en vue d'obtenir un schéma qui soit à la fois peu coûteux et précis, un bon compromis consiste à utiliser la méthode des trapèzes, et donc d'utiliser la définition suivante de la moyenne de $\hat{r}(Y_P)$ sur $[\tau^k, \tau^{k+1}]$ ($\hat{r}^k = \hat{r}(Y_P^k)$)

$$\langle \hat{Y}_P \rangle_{[\tau^k, \tau^{k+1}]} = \frac{\hat{r}^k + \hat{r}^{k+1}}{2}. \quad (53)$$

Avec cette définition, on peut définir les valeurs approchées $\tilde{\tau}_f$ et \tilde{x}_f :

$$\begin{aligned} \tilde{\tau}_f &= \frac{2}{\hat{r}^0}, \\ \tilde{x}_f &= \frac{\bar{u}_* + \bar{u}_f}{\hat{r}^0}. \end{aligned} \quad (54)$$

La première relation est déduite de la relation

$$dY_P = \hat{r}(Y_P) d\tau,$$

qu' on intègre à droite sur $]0, 1[$ et à gauche sur toute la zone $]0, \tau_f[$, en utilisant l'approximation précédente sur $\hat{r}(Y_P)$; la deuxième relation est obtenue de la relation

$$d\bar{x} = \bar{u} d\tau,$$

qu'on intègre à gauche sur $]0, \bar{x}_f[$, et à droite sur $]0, \tau_f[$. En utilisant les définitions des états limites "*" et "f" pour P et \bar{u} , on peut montrer que, dans le cas où $\hat{r}(Y_P) = \hat{r}_0 (1 - Y_P)^{\frac{1}{2}}$, avec \hat{r}_0 constante strictement positive, que l'on obtient les valeurs analytiques exactes de la proposition (A.7). Pour les valeurs intermédiaires, i.e. pour une itération donnée k , on obtient

$$\begin{aligned} \tau^{k+1} &= \tau^k + \frac{2}{N} \frac{1}{\hat{r}^k + \hat{r}^{k+1}}, \\ \bar{x}^{k+1} &= \bar{x}^k \frac{\bar{u}^k + \bar{u}^{k+1}}{2} (\Delta\tau)^{k+1}, \end{aligned} \quad (55)$$

où $(\Delta\tau)^{k+1} = \tau^{k+1} - \tau^k$. On vient donc de définir une méthode de résolution dont la précision n'est portée que sur les variables τ et \bar{x} . Le schéma est de plus exact aux points extrêmes de la zone de réaction dans le cas particulier où $\hat{r}(Y_p) = \hat{r}_0 \sqrt{1 - Y_p}$.

Pour le modèle WK monophasique, où le fluide est régi par la loi des gaz parfaits, on peut montrer que le système différentiel, écrit dans le repère de l'onde équivaut au système suivant (en reprenant les notations précédentes)

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d\bar{x}}{d\tau} = \bar{u}, \\ d\bar{m} = -2\bar{m}\hat{w}_0 d\tau, \\ d(P + \bar{m}\bar{u}) = \frac{d\bar{m}}{d\tau} d\bar{x}, \\ d\left(c^2 + \frac{(\gamma-1)}{2}\bar{u}^2 - (\gamma-1)qY_p\right) = 0, \\ dY_p = \hat{r}(Y_p) d\tau. \end{array} \right.$$

Dans le cas particulier où $\hat{r}(Y_p) = \hat{r}_0 \sqrt{1 - Y_p}$, on a vu qu'on sait déterminer Y_p analytiquement. Il est également facile de voir que

$$\bar{m}(\tau) = \bar{m}(0) \exp(-2\hat{w}_0 \tau),$$

est la solution analytique de \bar{m} , où $\bar{m}(0) = \bar{m}^*$. On peut déduire des expressions analytiques pour chacune des variables de l'écoulement, en revanche, on ne peut déterminer directement la valeur de P^* .



Unité de recherche INRIA Sophia Antipolis
2004, route des Lucioles - BP 93 - 06902 Sophia Antipolis Cedex (France)

Unité de recherche INRIA Futurs : Parc Club Orsay Université - ZAC des Vignes
4, rue Jacques Monod - 91893 ORSAY Cedex (France)

Unité de recherche INRIA Lorraine : LORIA, Technopôle de Nancy-Brabois - Campus scientifique que
615, rue du Jardin Botanique - BP 101 - 54602 Villers-lès-Nancy Cedex (France)

Unité de recherche INRIA Rennes : IRISA, Campus universitaire de Beaulieu - 35042 Rennes Cedex (France)

Unité de recherche INRIA Rhône-Alpes : 655, avenue de l'Europe - 38334 Montbonnot Saint-Ismier (France)

Unité de recherche INRIA Rocquencourt : Domaine de Voluceau - Rocquencourt - BP 105 - 78153 Le Chesnay Cedex (France)

Éditeur
INRIA - Domaine de Voluceau - Rocquencourt, BP 105 - 78153 Le Chesnay Cedex (France)
<http://www.inria.fr>
ISSN 0249-6399