

UNIVERSITE DE PROVENCE – AIX MARSEILLE I
Institut Universitaire des Systèmes Thermiques Industriels
- UMR CNRS 6595 -

THESE
pour obtenir le grade de
DOCTEUR DE L'UNIVERSITE DE PROVENCE
Ecole Doctorale 353 SCIENCES POUR L'INGENIEUR
Spécialité MECANIQUE ENERGETIQUE

présentée et soutenue publiquement
par

Laurent MUNIER

le 12 Octobre 2011

**SIMULATIONS EXPERIMENTALE ET NUMERIQUE DES EFFETS
RETARDES D'UNE EXPLOSION EN MILIEU CLOS ET EN
PRESENCE DE PRODUITS LIQUIDES**

Thèse dirigée par Richard SAUREL, IUSTI, Université de Provence

Jury :

Pr. Richard Saurel	Directeur de thèse, IUSTI, Université de Provence
Pr. Jean Marie Buchlin	Rapporteur, Institut Von Karman de Dynamique des Fluides,
Dr. Gilles Dusserre	Rapporteur, Ecole des Mines d'Alès
Dr. Steven Kerampran	Examineur, ENSTA Bretagne
Dr. Lazar Houas,	Examineur, IUSTI, Université de Provence
M. Emmanuel Lapébie	Invité, Ingénieur de Recherche, CEA/DAM



PLAN DU MEMOIRE

Préambule	p. 7
Nomenclature	p. 8
<u>Partie I Contexte scientifique et notion de terme source</u>	p.13
I.1 Terme Source d'un événement catastrophique	p.14
I.2 Scénario étudié – Explosion en milieu confiné	p.17
I.2.1 Description générale et analyse bibliographique	p.17
I.2.2 Expérimentations à échelle réduite – Approche qualitative	p.25
I.3 Explosion par impact d'un réservoir de liquide à P ambiante	p.42
I.4 Problématique scientifique / Modélisation multiphasique	p.48
I.4.1 Modélisation 0D instationnaire	p.48
I.4.2 Analogie avec les moteurs à explosion	p.50
I.5 Hypothèses initiales et précision du domaine d'études	p.57
I.6 Bibliographie de la Partie I	p.62
<u>Partie II Etude et modélisation de la détonation d'une charge explosive en milieu clos</u>	p.66
II.1 Etat de l'art et position de l'étude	p.67
II.1.1 Phénoménologie	p.67
II.1.2 Analyse des résultats bibliographiques	p.84
II.1.3 Position de l'étude et méthodologie	p.92
II.2 Modélisation des effets d'une explosion en milieu clos	p.96
II.2.1 Détermination des propriétés énergétiques des explosifs testés	p.96
II.2.2 Modèles de détermination de l'état quasi-statique	p.99
II.2.3 Modélisation 0D(t) de la montée en pression du milieu	p.132
II.2.4 Analyse des enregistrements VNUR et discussion sur l'évolution du champ de température interne	p.147
II.3 Influence de la présence d'un liquide et d'une surface de fuite	p.164
II.3.1 Influence de la présence d'une surface de fuite de faible dimension	p.164
II.3.2 Influence de la présence de liquide dans le volume	p.168
II.4 Récapitulatif	p.182
II.5 Bibliographie de la Partie II	p.184
<u>Partie III Evaporation d'un nuage de goutte et solution de modélisation du problème posé</u>	p.190
III.1 Motifs, objectifs et hypothèses initiales	p.191
III.1.1 Hypothèses initiales et intervalles d'études	p.191
III.1.2 Rappel des objectifs de la modélisation	p.192
III.2 Etat de l'art sur l'étude de l'évaporation d'un milieu liquide	p.192
III.2.1 Différents systèmes étudiés dans la littérature scientifique	p.192
III.2.2 Evaporation d'une goutte de liquide	p.193
III.2.3 Travaux fondamentaux ayant servis de base à notre étude	p.196
III.2.4 Position de l'étude par rapport aux travaux de la littérature	p.204

III.3 Equations de la dynamique d'un écoulement multiphasique et notion d'interface	p.206
III.3.1. Eléments mathématiques utilisés	p.206
III.3.2 Equations de la dynamique des phases pures	p.209
III.3.3 Relations de saut à une interface I entre un liquide et un gaz	p.211
III.3.4 Détermination des coefficients d'échanges entre phases et relations thermodynamiques	p.218
III.3.5 Récapitulatif dans le cas particulier d'une goutte d'eau pure dans un gaz composé de plusieurs espèces i	p.225
III.4 Modélisation 0D d'un écoulement multiphasique particulier en présence de transferts de masses et d'énergies	p.229
III.4.1 Système multiphasique à 7 équations	p.229
III.4.2 Application à l'évaporation de phases liquides Modélisation 0D(t)	p.231
III.4.3 Résultats et validation du modèle : modélisation de l'évaporation de gouttes	p.236
III.5 Modélisation 0D d'une explosion en milieu clos ou partiellement ouvert en présence de produit liquide	p.243
III.5.1 Hypothèses	p.243
III.5.2 Intégration des équations de conservation sur le volume V	p.244
III.5.3 Détermination des intégrales de transfert sur A_i	p.249
III.5.4 Relations de fermeture du système	p.250
III.5.5 Modélisation des échanges à la surface de fuite du volume V	p.250
III.5.6 Récapitulatif du modèle	p.256
III.6 Bibliographie de la partie III	p.259
<u>Partie IV Conclusion générale et perspectives</u>	p.262
IV.1 Conclusions générales	p.263
IV.2 Perspectives	p.265
Annexe A	p.272
Annexe B	p.282
Annexe C	p.307

PREAMBULE

Ce mémoire de thèse conclut cinq années de travail. Les travaux de recherche se sont effectivement répartis sur cette durée, car ils constituent une partie de mes activités en tant qu'ingénieur chercheur au CEA Gramat.

La problématique générale de cette thèse s'inscrit dans les projets de recherche et d'expertise du Laboratoire Efficacité des Compositions Energétiques du Service Détonique, Mécanique et Thermique, du centre de Gramat.

Différents sujets ne sont pas détaillés dans ce mémoire. Parmi eux, je citerai les travaux de développement d'un pyromètre infrarouge non intrusif, la réalisation de nombreuses expérimentations de destruction par impact de stockages de produits chimiques, le suivi de thèses menées au sein de l'équipe Risques de l'Ecole des Mines d'Alès, ou bien encore l'étude de la fragmentation/évaporation sous choc d'une goutte liquide. Ces différents points sont résumés dans un document joint au mémoire, appelé « Production ». A la fin de ce document sont recensées mes publications rédigées en tant que premier auteur (en congrès ou colloque avec proceedings). D'autres articles en tant que co-auteur ont fait l'objet de publications dans des journaux.

La thèse de doctorat s'est effectuée au CEA Centre de Gramat et à l'Université de Provence (Aix-Marseille I) comme établissement d'inscription pour la thèse, plus précisément en collaboration avec le Laboratoire IUSTI (Institut Universitaire des Systèmes Thermiques Industriels), UMR CNRS 6595. L'Ecole doctorale d'affiliation est l'ED 353 Sciences pour l'ingénieur : Mécanique, Physique et Micro-nanoélectroniques, dirigée par Richard Saurel, par ailleurs mon Directeur de Thèse.

J'ai été intégré à ce titre à l'équipe projet SMASH (Simulation, Modélisation, Analyse de Systèmes Hétérogènes), opération de recherche commune IUSTI et INRIA Sophia Antipolis.

Les expérimentations et analyses développées dans le mémoire ont été effectuées grâce aux installations et moyens de mesure du CEA Gramat. L'encadrement de la thèse a été assuré en interne par MM. Christian Le Gallic et Emmanuel Lapébie, ingénieurs chercheurs au CEA/DAM.

Les travaux de modélisation présentés en partie III ont fait l'objet d'extensions et constituent une illustration des travaux de l'équipe SMASH intégrés au code multiphasique 2D/3D CHYMERE. Les cas test et travaux de validation ont été réalisés par J. Massoni et O. Le Métayer à Marseille, au sein du laboratoire IUSTI.

Le mémoire est découpé en 4 parties : la partie I fait office d'introduction générale et permet de délimiter les contours généraux de l'étude au travers notamment de l'analyse d'expérimentations préliminaires. Les parties II et III restituent des recherches conduites en parallèle à partir de ces conclusions initiales. La partie IV constitue la conclusion générale du mémoire et ouvre plusieurs perspectives pour la suite des travaux.

NOMENCLATURE

Indices et exposants

k	Relatif à la phase k
i	Relatif à l'espèce i
I	Relatif à l'interface I
int, ext	Intérieur, extérieur
p	Relatif à la paroi
e	Echange, extérieur
g,G	Goutte, gaz
L, R	Left, Right
M	Relatif à la masse / massique
air	Air
mel	Mélange
eau	Eau
sat	Etat de saturation
L, l, liq	Liquide
*	Etat intermédiaire
inf	Relatif à l'infini
0	Etat initial
1	Relatif à la phase ou état 1
2	Relatif à la phase ou état 2
CJ	Etat dit de Chapman Jouguet
cv	Etat d'explosion à volume constant
ab	Combustion secondaire (afterburning)
ex	Relatif à l'explosif
qst	Etat quasi-statique
exp	Expérimental(e)
th	théorique
tot	Total(e)
det	détonation
+, -	Relatifs à une zone chaude ou froide
m	Montée
v	Vidange (retour à l'équilibre)

Nombres sans dimension

Symbole	Nombre de...	Formule	Signification
Re	Reynolds	$Re = \frac{\rho \cdot \delta \cdot \Delta u}{\mu}$	$Re = \frac{\text{flux convectif de la quantité de mouvement}}{\text{flux diffusif de la quantité de mouvement}}$
M	Mach	$M = \frac{c}{c_0}$	$M = \frac{\text{vitesse de l'écoulement}}{\text{vitesse du son}}$
Sc	Schmidt	$Sc = \frac{\mu}{\rho D}$	$Sc = \frac{\text{diffusion de la quantité de mouvement}}{\text{diffusion de la masse}}$
Sh	Sherwood	$Sh = \frac{H_M \cdot \delta}{D}$ ou $Sh = a + b \cdot Sc^c \cdot Re^d$	$Sh = \frac{\text{flux de masse en présence de convection}}{\text{flux de masse diffusif en l'absence de convection}}$
Nu	Nusselt	$Nu_L = \frac{H_{TL} \cdot \delta}{\lambda_L}$ ou $Nu = a + b \cdot Pr^c \cdot Re^d$	$Nu = \frac{\text{flux de chaleur en présence de convection}}{\text{flux de chaleur diffusif en l'absence de convection}}$
Pr	Prandtl	$Pr = \frac{\mu C_P}{\lambda}$	$Pr = \frac{\text{diffusion de la quantité de mouvement}}{\text{diffusion thermique}}$
Bi, Br, B_M	Nombre de Biot, de Masse ou de Spalding	$Bi = \frac{H_{Tg} R}{\lambda}$	
Pe	Peclet	$Pe = Re Pr$	
Da	Damköhler	$Da = \frac{\tau_t}{\tau_c}$	$Da = \frac{\text{temps caractéristique turbulence}}{\text{temps caractéristique chimique}}$
Le	Lewis	$Le = \frac{a}{D}$ avec a diffusivité thermique	$Le = \frac{\text{diffusion thermique}}{\text{diffusion de la masse}}$
We	Weber	$We = \frac{\rho d u^2}{\sigma}$	$We = \frac{\text{Energie cinétique écoulement}}{\text{Energie de cohésion du liquide}}$

Lettres et symboles

Thermodynamique et mécanique des fluides

Lettre ou symbole	Signification	Unités
c	Vitesse du son dans le milieu	m.s^{-1}
c_p, c_v	Chaleur massique à pression, volume cst.	$\text{J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$
C	Concentration molaire	mol/m^3
D	Coefficient de diffusion massique	$\text{m}^2.\text{s}^{-1}$
E	Energie totale spécifique	J.kg^{-1}
e	Energie interne spécifique	J.kg^{-1}
E_a	Energie d'activation spécifique	J.kg^{-1}
H	Enthalpie totale spécifique	J.kg^{-1}
H_f	Enthalpie de formation	J.mol^{-1} ou J.kg^{-1}
H_{vap}	Enthalpie de vaporisation	J.mol^{-1} ou J.kg^{-1}
h	Enthalpie spécifique	J.kg^{-1}
L_v	Chaleur latente de vaporisation	J.kg^{-1}
m	Masse	kg
M	Masse molaire	g.mol^{-1}
n	Nombre de moles	mole
P	Pression	Pascal (ou bar)
P_{sat}	Pression de saturation	Pascal (ou bar)
P_{crit}	Pression critique	Pascal (ou bar)
P_r	Pression réduite	-
q	Flux de chaleur	W.m^{-2}
q_{cond}	Flux de chaleur par conduction	W.m^{-2}
q_r	Flux de chaleur par rayonnement	W.m^{-2}
Q	Chaleur dégagée par une réaction	J.kg^{-1}
R	Constante des gaz parfaits	$\text{J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$
s	Entropie	$\text{J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$
T	Température	K ou °C
T_{sat}	Température de saturation	K ou °C
T_{crit}	Température critique	K ou °C
T_r	Température réduite	-
V	Volume	m^3
v	Covolume	$\text{m}^3.\text{kg}^{-1}$
W	Taux de chargement en explosif	kg/m^3

X	Fonction caractéristique, fraction molaire	-
Y	Fraction massique	-
H_M	Coefficient d'échanges massiques	
H_T	Coefficient d'échanges thermiques	W.m ⁻² .K ⁻¹
γ	Coefficient polytropique	-
Γ	Coefficient polytropique	-
λ	Conductivité thermique	W.m ⁻¹ .K ⁻¹
μ	Viscosité dynamique	kg.m ⁻¹ .s ⁻¹
ν	Viscosité cinématique	m ² .s ⁻¹
ρ	Masse volumique	kg.m ⁻³
σ	Tension de surface	N.m ⁻¹
α	Fraction volumique	-

NB: Les lettres a,b,c,d et x,y,z,o, et p sont ponctuellement utilisées dans le mémoire comme indice ou variable représentant des coefficients ou nombres entiers. Par exemple, elles représentent le nombre d'atomes de C, H, N, O dans une molécule explosive.

Espace et temps

Lettre ou symbole	Signification	Unités
A	Aire ou surface	m ²
d	Distance, diamètre	m
f	Fréquence	Hz
f_e	Fréquence d'échantillonnage	Hz
f_c	Fréquence de coupure	Hz
L	Longueur caractéristique	m
M	Point de l'espace de travail	-
N	Niveau (sur n bits)	-
n	Indice du milieu considéré	-
n	Normale	-
p	Pixel	-
r	Coordonnée radiale, rayon	m
R	Rayon	m
S	Surface	m ²
S_p	Spectre de puissance	/
t	Temps	s
T	Période	s
u	Vitesse selon la coordonnée x	m.s ⁻¹
V	Vitesse	m.s ⁻¹
x, y, z	Coordonnées cartésiennes	m
δ	Ecart, longueur caractéristique	-, m
θ	Temps adimensionné	-
λ	Longueur d'onde	m
τ	Temps caractéristique	s
η	Distance radiale réduite	-
Φ	Diamètre	m

Partie I

Contexte scientifique et notion de terme source



Aérogologie d'un panache de fumée lors d'un incendie et dispersion atmosphérique de particules

I.1 Terme Source d'un événement catastrophique

Peut-on prédire de manière fiable les conséquences de la destruction d'un stockage de produits dangereux ? Cette question est au cœur des études menées par le CEA Gramat et concerne de manière plus générale le problème scientifique de la « dispersion atmosphérique » à comprendre ici comme *l'ensemble des mécanismes physiques de mélange d'une substance dans l'air de l'atmosphère* (définition du Ministère de l'Environnement). Dans les nombreux documents issus du monde de la sécurité industrielle [1 à 10], la dispersion atmosphérique fait en effet référence au « devenir d'un nuage de produit dangereux dans le temps et dans l'espace ». La modélisation de la dispersion atmosphérique dépend *a priori* des caractéristiques de la source d'émission, des conditions météorologiques et des conditions orographiques.

La connaissance - la modélisation - de la dispersion atmosphérique d'un produit toxique peut être utilisée à des fins de prévision - évaluation des risques d'une installation-, de gestion en temps réel d'une crise ou d'un évènement catastrophique, ou bien encore à des fins d'expertise ou de retour d'expérience.

L'émission du produit dans l'environnement peut être soit chronique, soit accidentelle (à comprendre ici comme « non désirée »). Divers outils de calcul sont aujourd'hui encore développés pour répondre aux problématiques du monde industriel. Si l'on ne peut se passer *in fine* d'une phase de validation expérimentale, l'utilisation de modèles numériques apporte une certaine rapidité et la possibilité de simuler un grand nombre de configurations. Les outils de calcul de la dispersion se répartissent communément en trois classes : les modèles gaussiens (paramétriques), les modèles intégraux et les modèles de type CFD, par ordre croissant de complexité.

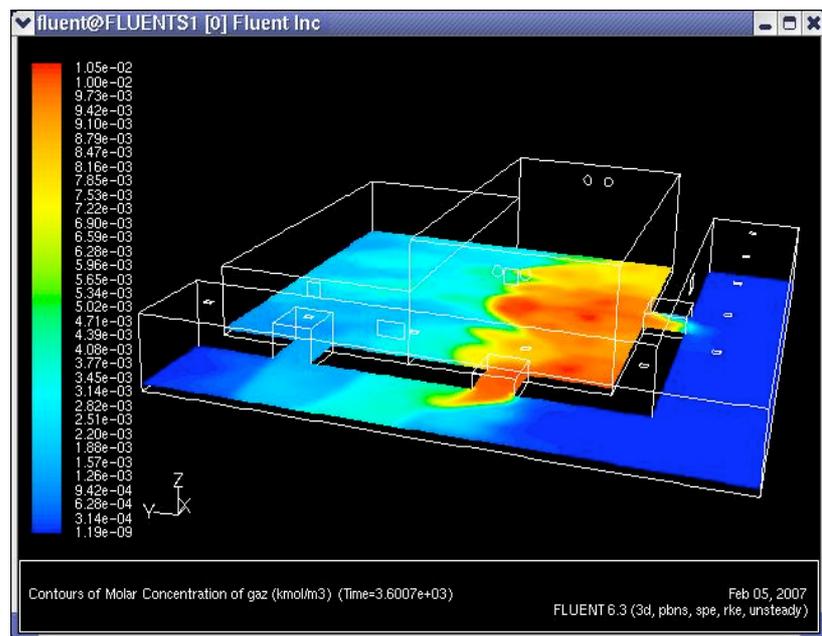


Figure 1 Exemple de simulation de la dispersion de gaz dans un bâtiment - logiciel Fluent

En amont de toute tentative de modélisation de la dispersion, il convient de quantifier de manière précise **le terme source** (*T.S*). D'après les scientifiques de l'INERIS [1 à 4], « on entend par terme source, tout ce qui conditionne la formation du nuage dangereux, c'est-à-dire les caractéristiques de la source d'émission initiale éventuellement modifiées par le champ proche ». Les avis convergent pour souligner l'importance de la quantification du terme source, qui doit être la meilleure possible quel que soit le cadre d'emploi des outils de modélisation.

Plus en détails, caractériser le terme source consiste à évaluer :

- « La masse totale de substance dangereuse libérée [...] ou le débit massique [...],
- La vitesse finale de la substance dangereuse rejetée,
- La température du rejet [jouant un rôle prépondérant sur l'aérodynamique du nuage],
- La valeur de la fraction de liquide (chaque phase présente), la répartition granulométrique ».

D'après ces quatre critères, les paramètres évidemment influents sont les propriétés physiques, chimiques et thermodynamiques du produit *rejeté*, le mode de rejet qui peut être instantané ou continu, et les possibles interactions physiques avec l'environnement.

Caractériser le T.S est un véritable challenge : cette quantification dépend *a priori* du scénario étudié. Il existe une série de termes « source » élémentaires tels que l'évaporation d'une flaque sous condition contrôlée (en pression et température), ou bien encore la fuite d'un jet calibré, mais les accidents industriels sont souvent beaucoup plus complexes. La figure 2 ci-dessous présente le cas d'une brèche sur une paroi d'un élément de stockage sous pression : le produit est éjecté dans l'atmosphère sous forme de vapeur, de jet liquide, de gouttes, de gouttelettes, d'aérosols puis de flaque. En outre, la présence d'obstacles influe directement sur la nature du rejet. D'une manière générale, le rejet est l'expression d'une transformation complexe de l'énergie interne sous la forme d'énergie cinétique et, éventuellement, de changements de phase du produit expulsé.

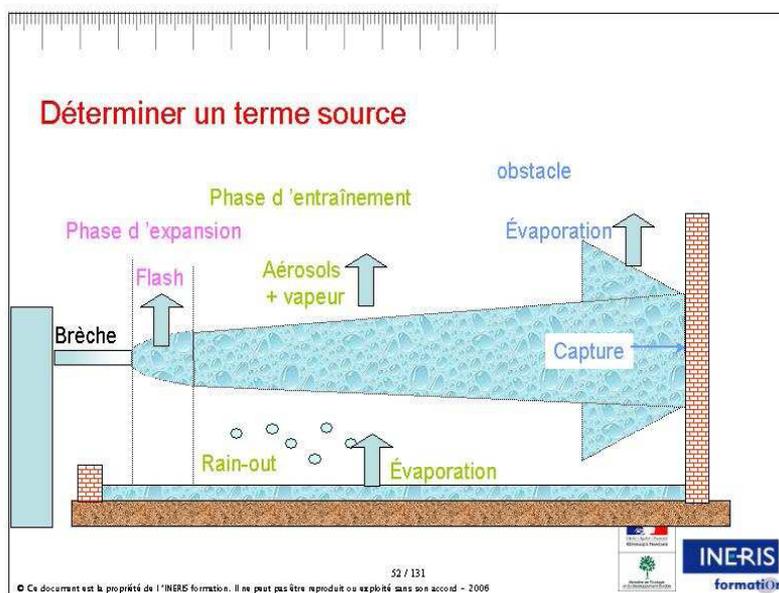


Figure 2 D'après [1], Schéma des composantes du T.S suite à l'ouverture d'un réservoir

produit dans le milieu ambiant : dans le cas d'une agression volontaire ou malveillante d'un site industriel, les éléments de stockage de produits dangereux peuvent être soumis à une onde de choc aérienne et/ou à l'impact de fragments ou débris propulsés à des vitesses de l'ordre de 1000 m/s, voire à des effets thermiques radiatifs, engendrés par le fonctionnement d'un engin explosif. Ce fait initiateur est directement lié aux paramètres listés plus haut et communément déterminés

Pour un tel événement, connaître la topologie de la phase liquide et la fraction de vapeur éjectée au cours du temps et dans l'espace est essentiel pour la suite de la modélisation. Les travaux menés par le CEA Gramat [35 à 38] s'inscrivent pleinement dans cette logique et dans cet effort de quantification du terme source.

Cependant, à la différence du cas d'un accident, il nous est essentiel de prendre en compte **le fait initiateur**, cause de la libération du

comme influents dans la littérature. On comprend aisément qu'une explosion connexe peut modifier l'environnement dans lequel est rejetée la substance dangereuse.

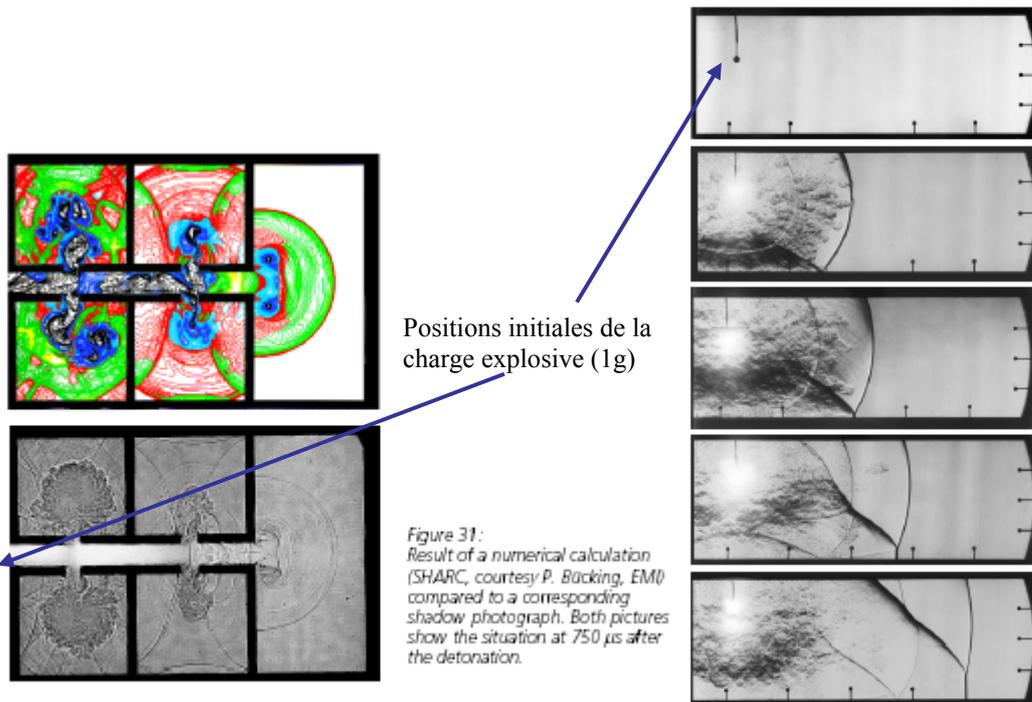


Figure 3 Mise en évidence par techniques optiques de la propagation du souffle dans un bâtiment, par expérimentations à petite échelle [21] – à gauche, propagation du souffle dans un bâtiment, à droite, formation d'un train d'ondes et du pied de Mach.

De plus, l'aspect « instantané » ou « continu » du rejet de produit est étroitement lié à l'échelle physique du problème à traiter d'une part, aux temps caractéristiques des phénomènes qu'il engendre d'autre part (transfert d'énergie, interaction avec l'environnement, etc.). En d'autres termes, il est important de hiérarchiser les difficultés de modélisation selon les bornes du problème, afin de ne négliger aucun effet ou couplage.

Pour résumer : la modélisation fiable et précise de la dispersion de produits tels que des produits chimiques toxiques, dans un milieu connexe (atmosphère, rivière, atmosphère confinée,...) nécessite une chaîne de modèles ou de codes numériques couplés. Le premier maillon consiste à connaître les caractéristiques de la libération du produit dans l'espace en terme de débit par exemple (débit massique, concentration, localisation,...). Selon la solution de modélisation choisie, il est important de définir clairement les frontières du terme source. Dans une problématique environnementale ou d'étude préventive de risque, il en existe une définition « officielle », ou tout du moins normalisée [1,4]. Dans le cadre de notre étude, le terme source est la conséquence d'une agression de type militaire ou malveillante, par définition fortement dynamique : utilisation d'explosif, projection de fragments, modification du champ de pression, etc.

Ces particularités font l'objet du paragraphe suivant.

I.2 Scénario étudié – Explosion en milieu confiné

I.2.1 Description générale et analyse bibliographique

Les spécificités de notre étude reposent tout d'abord sur le type d'évènement que l'on cherche à modéliser. Il s'agit d'une explosion d'une masse m d'explosif secondaire (de l'ordre de 60 kg) en milieu clos, de volume V , que l'on considère comme constant tout au long du processus thermodynamique : l'infrastructure résiste à l'explosion, ou tout du moins pendant un temps supérieur aux temps caractéristiques des phénomènes qui nous intéressent.

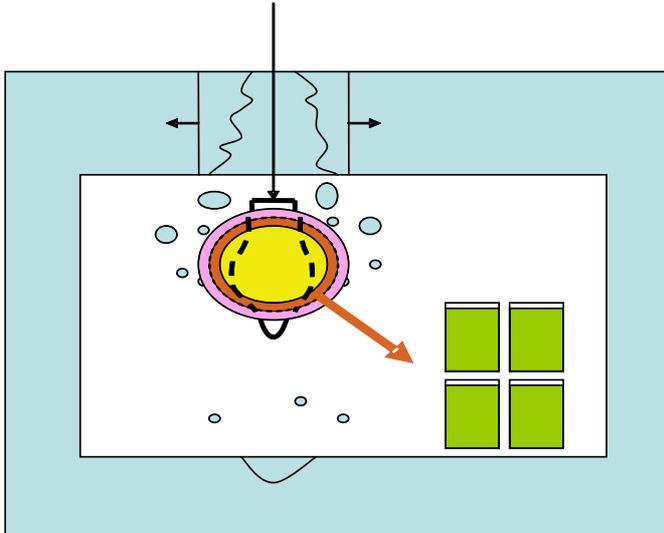


Figure 4 Explosion d'une charge improvisée ou militaire à l'intérieur d'une salle forte, en présence de produits liquides

À l'intérieur de ce volume sont stockés des produits chimiques liquides à pression et température ambiantes. Le liquide est initialement contenu dans des fûts métalliques ou plastiques, de contenances standards 60 ou 230 litres, dont les parois ont une épaisseur inférieure à 1 mm. Deux « familles » de liquides sont considérées et appelées respectivement *inertes* et *réactifs*. Les liquides réactifs sont susceptibles de réagir chimiquement avec les autres espèces gazeuses en présence. L'eau est un liquide inerte évident ici. Les dimensions caractéristiques du bâtiment correspondent à une longueur de 20 mètres pour une largeur de 10 mètres sur une hauteur de 5 mètres, soit un volume de 1000 m³. La quantité de produit stocké est de l'ordre de 1,2 tonne. Le système étudié n'est pas fermé : des échanges de masse et d'énergie sont possibles à travers une surface de fuite (ou brèche) qui reste faible devant la surface totale délimitant le volume d'étude. Cette surface de fuite peut être une ouverture causée par le passage d'une arme, une ouverture due à l'explosion ou plus simplement une ouverture de type porte ou fenêtre.

La charge explosive génère une gerbe d'éclats (directs ou indirects) d'une masse de l'ordre de 10 grammes, propulsés à des vitesses supérieures à 1000 m/s. L'interaction des fragments avec les unités de stockage induit une libération brutale du liquide dans la pièce sous forme de vapeur, de gouttes, gouttelettes, ou d'éléments fluides de taille importante, voire d'une flaque. Le coup de bélier hydraulique ainsi que la dynamique d'éjection du jet liquide font l'objet d'une étude particulière menée en parallèle de cette thèse. Pour des raisons de clarté, cette partie des travaux de recherche, qui représente un champ d'investigation à part entière, n'est pas relatée ici. De cette étude, qui s'est notamment traduite par la thèse de N. Lecysyn [28 à 32], nous déduisons des hypothèses ou données d'entrée simplificatrices en ce qui concerne le problème posé ici : on considère la topologie de la phase liquide dispersée dans le volume d'étude à la suite de l'explosion comme connue (brouillard ou distribution initiale de gouttes par exemple). Le chapitre I.3 détaille plus particulièrement le cheminement suivi.

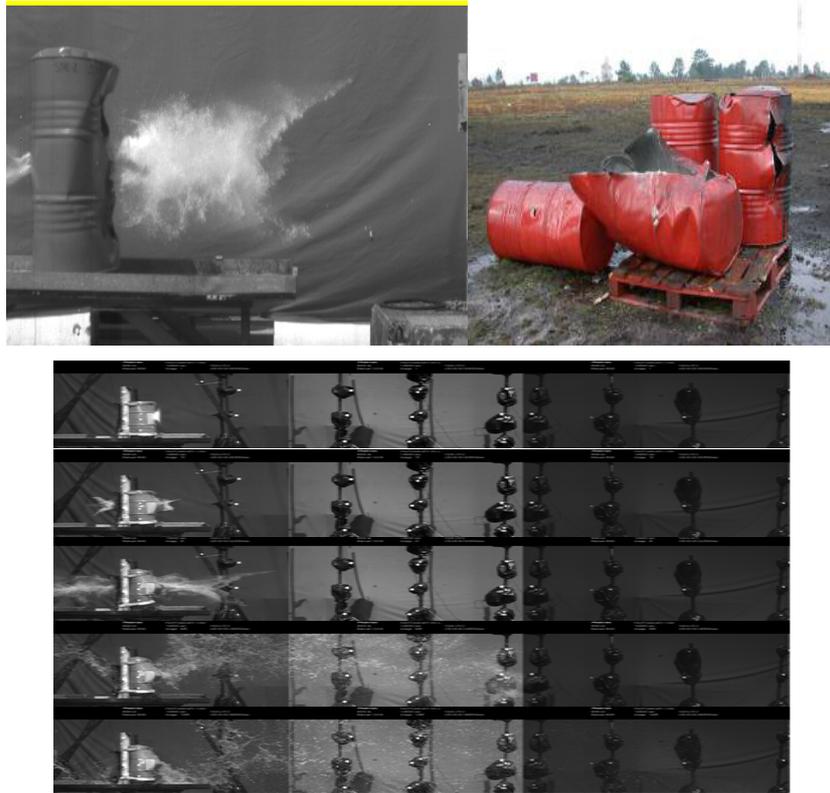


Figure 5 En bas, explosion de réservoirs métalliques à pression ambiante sous l'impact de projectiles – à droite, état résiduel – à gauche, phases d'éjection du liquide dans son environnement proche

Une analyse préliminaire de la phénoménologie liée à l'interaction arme/cible menée à Gramat entre 2000 et 2004 a montré que les différents événements consécutifs à l'explosion d'une charge à l'intérieur d'un bâtiment résistant (ou « bunker ») pouvaient être identifiés chronologiquement selon le processus suivant :

- Génération d'éclats, développement initial d'une boule de feu, propagation d'ondes de choc, rayonnement intense,
- Pénétration des éclats dans les conteneurs et ouverture dynamique du conteneur,
- Ejection dynamique et fragmentation primaire du liquide,
- Fragmentation secondaire du liquide sous l'effet de l'onde de souffle,
- Détente des produits de détonation de l'explosif, développement continu de la boule de feu rayonnante, d'instabilités hydrodynamiques en bordure de boule de feu, et combustion secondaire des produits gazeux sous-oxygénés,
- Transferts de chaleur et de masse entre « l'atmosphère » (produits de détonation + air ambiant) et les produits liquides,
- Production de débit à la brèche de la salle du mélange des suspensions liquides, de leur vapeur et des gaz ambiants.

L'identification de la chaîne d'évènements s'appuie notamment sur une série de campagnes expérimentales, dites « unitaires », d'impact de projectiles sur des conteneurs standards [35]. Les différentes étapes du processus ont des temps caractéristiques compris entre 10^{-5} s. et 10 s.

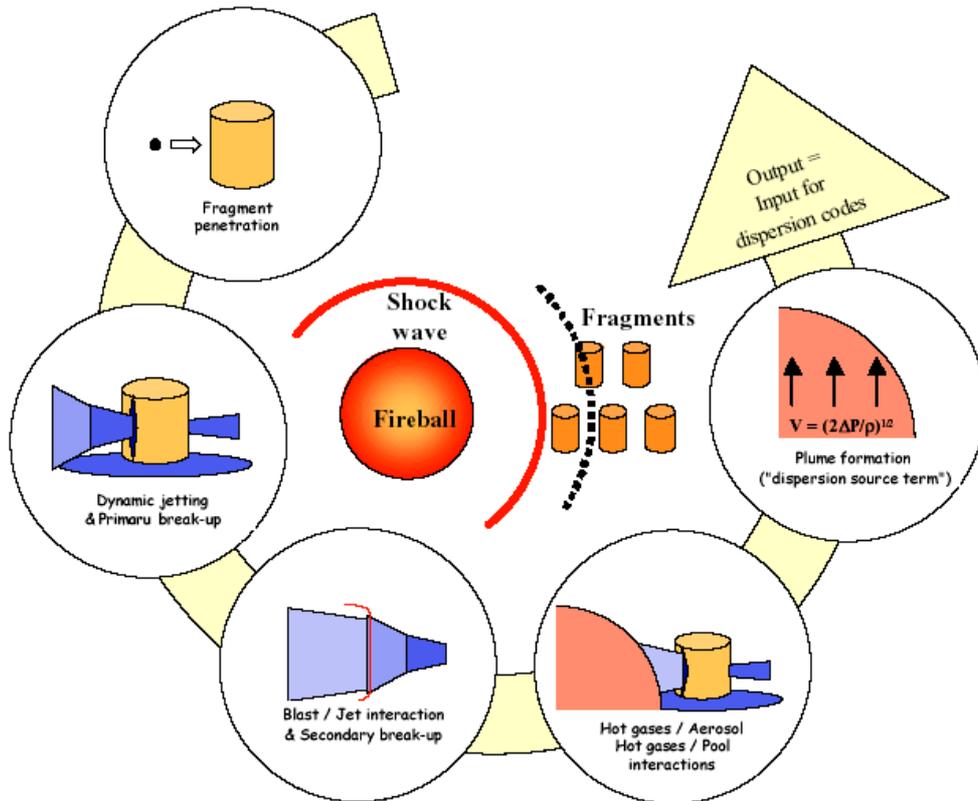


Figure 6 Chaînes d'évènements de l'interaction charge explosive / container

Problème à traiter	Temps caractéristiques (s) et ordres de grandeur à échelle 1
Détonation de l'explosif de la charge	~10E-5
Rupture du confinement métallique de la charge	~ 10E-5
Développement d'une boule de feu	~10E-3
Génération d'une gerbe d'éclats	~ 10E-4
Génération et propagation d'une onde de souffle	~10E-2
Interaction des éclats avec les conteneurs	$t_0 + 5 \text{ ms} / 1500 \text{ m/s}$
Formation de jets, nappes liquides à la brèche des conteneurs, fragmentation	~ 10E-3
Interaction de l'onde de souffle avec les nappes liquides	~ $t_0 + 10 \text{ ms} / 10 \text{ bars}$
Vidange des conteneurs	~ 10E-1 à 1
Mélange des produits de détonation de la charge avec l'air de la salle et combustion secondaire	~ 10E-1
Échanges thermiques entre les agents chimiques et le mélange, vaporisation.	~10E-1
Formation de rejets à la brèche de la salle	10E-2 à 10

Figure 7 Temps caractéristiques des phénomènes participants au terme source [35]

Les phénomènes engendrés par la détonation de la charge explosive se traduisent bien entendu par une variation couplée des champs de pression et de température dans le milieu clos de volume constant. Les produits de détonation de l'explosif, en général sous-oxygénés, rentrent en combustion turbulente avec l'air présent.

La phase liquide se trouve dispersée dans un milieu chaud, localement en mouvement. Afin de quantifier les rejets éventuels de produit au travers de la brèche du bâtiment, il devient primordial de caractériser les échanges entre les deux phases, la fraction de liquide vaporisée ou évacuée vers l'extérieur sous forme liquide. Le liquide va en effet interagir avec le gaz environnant essentiellement par transferts de chaleur et de masse. Selon la nature du liquide, des réactions chimiques peuvent se produire, comme par exemple des réactions de combustion. De nouvelles espèces chimiques sont alors susceptibles d'apparaître.

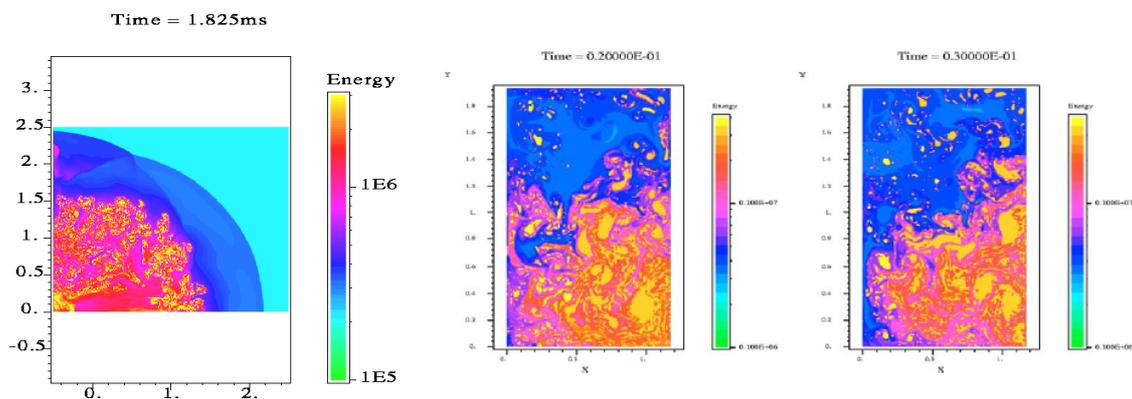


Figure 8 Simulation par le code multiphasique EDEN du champ de température suite à une explosion en milieu confiné – $t = 1,825$ ms, puis 20 et 30 ms après détonation de la charge [24].

Les événements étudiés couvrent un large spectre au sein de la mécanique des fluides, *a priori* compressibles, de la détonique à la physique des transferts en écoulement multiphasique, alors que la combustion des produits de détonation d'un explosif est pilotée par des instabilités de types Rayleigh- Taylor et Richtmyer-Meshkov. On étudie dans cette thèse un système complexe, et son évolution temporelle sur une étendue dynamique de 10^6 secondes (rapport entre le temps caractéristique de l'évènement le plus long sur celui de l'évènement le plus court). Chaque sous-phénomène fait l'objet d'une analyse bibliographique particulière, à l'origine même de l'architecture de ce mémoire.

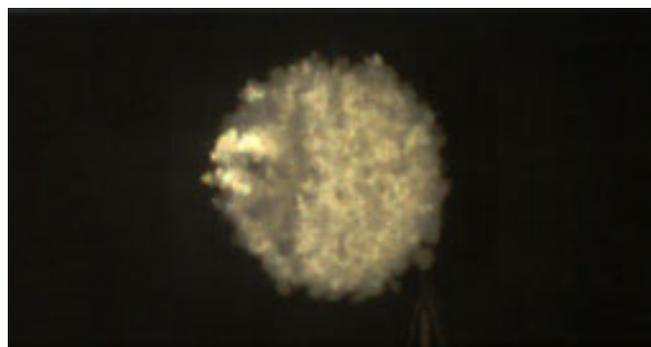


Figure 9 Visualisation de la boule de feu turbulente engendrée par la détonation d'une charge sphérique à $t_0 + 2$ ms – expérimentations CEA Gramat [38]

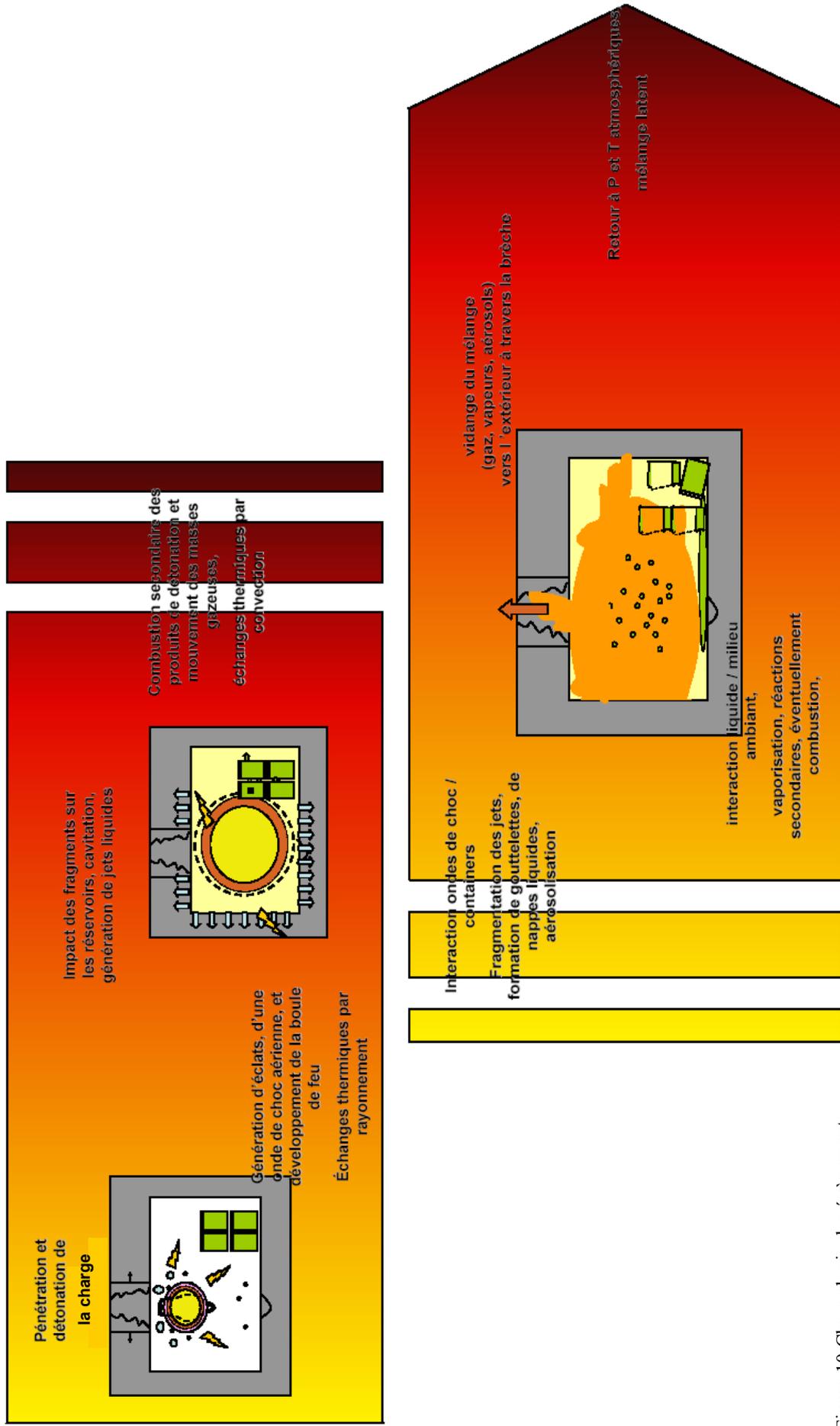


Figure 10 Chronologie des événements internes au volume d'étude, lors d'une explosion en présence de produits chimiques liquides

La destruction de stockages de produits chimiques étant une question sensible, il existe peu de littérature ouverte abordant directement ce sujet, que ce soit dans le domaine de la Défense ou celui de la sécurité industrielle. On peut cependant citer un certain nombre de documents ayant notamment servi de base pour élaborer les protocoles expérimentaux décrits plus loin dans ce mémoire. Ces documents sont de trois ordres :

- Les références [12 à 14] font état de lacunes concernant la modélisation de termes source dynamiques liés à une explosion initiale. Plus précisément, la référence [13] explique les conclusions relatives à l'exposition des troupes américaines à des agents chimiques dangereux à la suite d'une opération de destruction de stockages lors de la première guerre du Golfe et détaille les manques de validité des modèles et expériences menées *a priori* ou *a posteriori*.
- Les références [19 à 24] abordent les effets d'une arme et des explosifs en milieu clos, en termes de pression et de température. Par exemple, le document [20] décrit les essais effectués dans le cadre du programme Tomahawk aux États-Unis. Il recense les pressions quasi statiques engendrées par des explosifs de référence (PBXN, Tritonal...) en milieu confiné ou semi-confiné. Seuls les états thermodynamiques finaux ou intermédiaires (par exemple la pression maximale atteinte) sont évalués.

En France, on peut citer les travaux du même ordre du Gerbam [48, 49] et ceux du CEA [38], portant sur la performance de charges anti-infrastructures et des effets de souffle de charges militaires.

Les travaux du LLNL [27] s'intéressent plus précisément à la combustion secondaire des explosifs et à la variation temporelle de la pression quasi statique qui en résulte, au sein de structures mono-salles ou multicellulaires. Il existe par ailleurs une littérature abondante sur le sujet même si des détails essentiels à la compréhension des phénomènes ne figurent pas toujours dans des sources au formalisme réduit. Peu de résultats, tant expérimentaux que numériques, sont accessibles en ce qui concerne le champ de température généré dans de telles conditions. Ceci est lié à la fois à la complexité des phénomènes associés à la variable température et aux problèmes technologiques rencontrés pour réaliser une mesure fiable de cette grandeur.

- Les références [15 à 18] décrivent plus particulièrement des expérimentations de destruction de stockages de produits liquides, implantés dans des installations à échelle réduite ou à échelle réelle.

Dans la référence [17], Seebaugh décrit les campagnes expérimentales pilotées par la Defence Threat Reduction Agency (USA) et effectuées entre 1995 et 2000. Il évoque également le comportement de stockages de poudre et de simulants d'agents B face à l'explosion d'une arme militaire, agents stockés dans des structures à échelle 1, 1/6 ou encore 1/3.

Pour ce deuxième volet, des descriptions macroscopiques des dégâts structuraux et du comportement des agents sont accessibles. Des estimations sont également effectuées sur la quantité d'agent dispersée dans l'atmosphère. Seebaugh précise aussi les niveaux de pression et de température atteints dans les enceintes respectives, ainsi que les vitesses des rejets observés aux différentes brèches ou ouvertures des infrastructures. Ce travail est le plus complet trouvé dans la littérature ouverte, en ce qui concerne la complexité du scénario simulé

expérimentalement. L'auteur ne tente toutefois pas de modélisation fine des phénomènes ou d'extrapolation à d'autres configurations.

Dans la référence [15], Sheffield décrit des essais de détonation d'armes confinées en milieu clos et en présence de fûts industriels vides ou remplis de liquide (eau, diesel...). Il étudie plus particulièrement l'influence du point de détonation de l'arme sur les dégâts macroscopiques *post-mortem* (au centre de la pièce, dans le sol, etc.).

Le tableau ci-dessous récapitule les données d'entrées des expérimentations d'explosion en milieu confiné évoquées dans cette courte bibliographie, dont les résultats seront utilisés pour analyser nos propres conclusions.

Référence	Explosif	V installation	Produits	Mesures
[15,16]	1 à 4 kg TNT	25 m ³	Fuel, eau (entre 10 et 50 litres)	Vidéo, P, T
[17,18]	~30 kg TNT	>20 m ³	Bg, SF6, aluminium...	P, T, PIV*...
[20]	10 kg de PBXN, TNT, Tritonal...	178 m ³	/	P, T
[21]	qq grammes, TNT	0,05 m ³	/	P, ombroscopie

* PIV : particle image velocimetry

Tableau 1 Données d'entrée principales des expérimentations de la bibliographie

A noter que les moyens de diagnostics utilisés sont communément des moyens de visualisation ultra-rapide (par visualisation directe ou technique interférométrique), des capteurs de pressions, ainsi que des thermocouples, même si ces derniers ne restituent qu'une image partielle (due à l'inertie de ce type de capteurs) du champ de T.

Parallèlement à ces deux types de sources bibliographiques, on peut citer les travaux récents de simulations numériques et expérimentales de l'atténuation des effets destructeurs d'une explosion par la présence ou l'introduction de brouillards calibrés (injection de liquide par le biais d'une buse sous pression, dans un volume fixé). Cette application est développée en particulier dans le cadre de la sécurisation de navires de guerre [25]. Pour optimiser ce procédé en termes de délais d'introduction par rapport à l'explosion ou de distribution initiale de gouttes, l'utilisation de codes multiphasiques se justifie : les références [24 à 26] démontrent l'efficacité d'outils numériques pour simuler l'évaporation d'un nuage de gouttelettes sous haute température, en considérant par exemple une répartition statistique du rayon initial des gouttes. Toutefois, afin de limiter le temps de calcul, et de simplifier l'algorithme de résolution du problème posé, les hypothèses portant sur l'évaporation des gouttes restent simples : phase liquide initialement à l'état de saturation, conductivité infinie dans la phase liquide ou modèle de régression en d², etc.

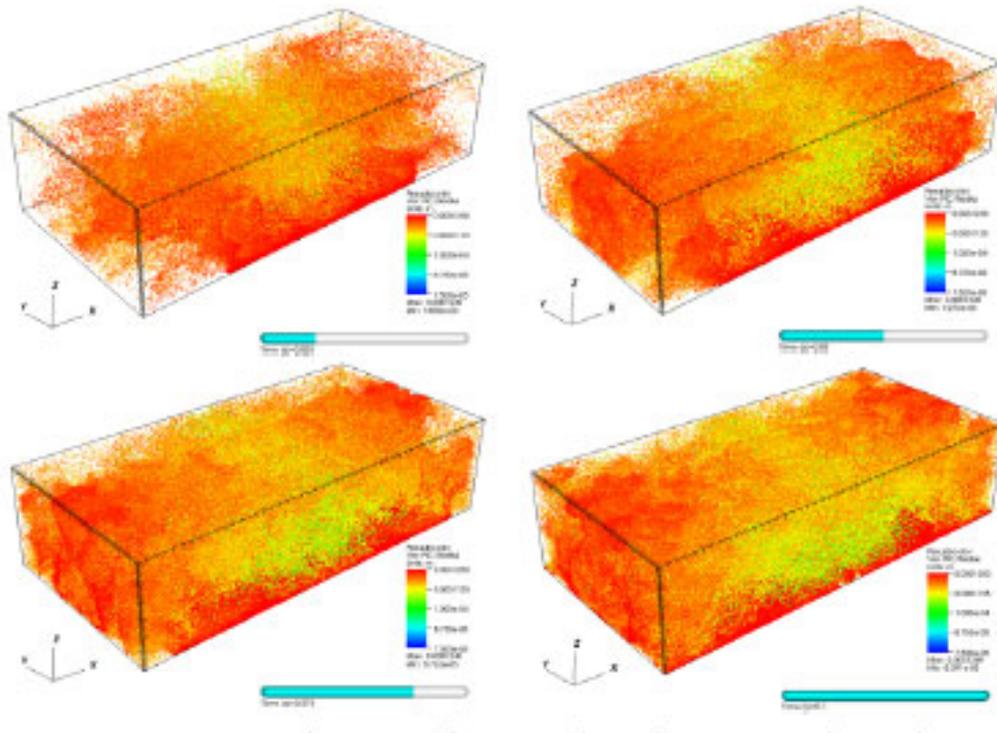


Figure 11 Simulation à l'aide du code PIC3D du comportement et de l'évaporation d'un nuage de gouttes sous haute température, dans un volume fermé [25].

Pour poursuivre l'analyse du problème, il est important de souligner que les études expérimentales citées ci-dessus, ainsi que les expériences « unitaires » menées à la DGA entre 2000 et 2004 sont des éléments nécessaires mais non suffisants pour répondre aux questions suivantes :

- Quelles sont les sorties en terme d'éclats, de pression et température d'une charge explosive et leurs conséquences sur des moyens de stockage standards ?
- Quelle est la séquence des événements se déroulant à l'intérieur d'une cible résistante, lieu potentiel de stockage de produits biologiques ou chimiques ?

Les sous-questions sont évidemment multiples : les containers sont-ils détruits ? Les produits sont-ils détruits ou dégradés ? La fonction de stockage est-elle annihilée ? Quel est le facteur influent, pression ou température ? Que rejette-t-on, en termes de granulométrie dans l'atmosphère ? ...

La présente étude tend à faire le lien entre ces deux niveaux d'expertise et les protocoles expérimentaux choisis doivent permettre de répondre aux questions ci-dessus.

Pour fixer les idées du lecteur, le paragraphe suivant décrit une première série d'expérimentations à échelle réduite simulant le scénario d'étude complet, réalisées en premier lieu (en 2005) afin de limiter l'éventail des travaux et d'orienter les efforts de modélisation [37, 38 et 46, 47].

I.2.2 Expérimentations à échelle réduite – approche qualitative

Basée sur les références bibliographiques, une analyse dimensionnelle du problème et des états initiaux et finaux prévisibles du système {chambre + explosif + produit liquide}, a permis de définir une échelle de travail de 1/8^e (analyse selon le théorème Π de Vashy – Buckingham [37]).

Une chambre de détonation parallélépipédique, appelée « bunker » (voir annexe 2 et figure 12), a été ainsi dimensionnée pour simuler la destruction d'une unité de stockage de produits liquides. De volume proche de 2 m³ cette enceinte est étanche mais laisse la possibilité de simuler une ouverture vers l'extérieur que l'on peut calibrer.

Plusieurs expérimentations dites « bunker » ont été réalisées au début des travaux de thèse sur le site de Gramat et sur le camp militaire de Mourmelon.

Lors de ces premières campagnes, le CEA Gramat s'est plus particulièrement penché sur le déroulement des phénomènes rapides et les échanges énergétiques induits par la détonation de la charge explosive, en mettant notamment en œuvre ses moyens de mesures (P et T) et de visualisation. Le Centre d'Études du Bouchet (CEB) a participé à une partie de ces expérimentations pour la partie analyse chimique et dynamique du rejet de produits dans l'atmosphère.



Figure 12 Vues d'ensemble, interne et externe du « bunker » CEA de volume 1,875 m³ – à gauche, mise en place d'une charge explosive et de container au centre du volume – à droite, vue extérieure de l'enceinte

Pour simuler les éclats potentiels d'une charge réelle ou la fragmentation naturelle d'un confinement métallique, on utilise des billes en acier de 1,5 ou 3 mm collées sur la surface latérale d'une charge explosive cylindrique en octoviton (96% d'octogène, 4% de viton), comme l'illustre la figure 13. Sur l'ensemble des expérimentations, plusieurs types de charge ont été utilisés :

- une charge cylindrique nue, afin de mesurer les effets propres à la détonation de la masse d'explosif,
- des charges explosives recouvertes de billes de 1,5 ou 3 mm uniquement sur un secteur angulaire de 90°;
- des charges recouvertes de billes sur l'ensemble de la surface latérale du cylindre.

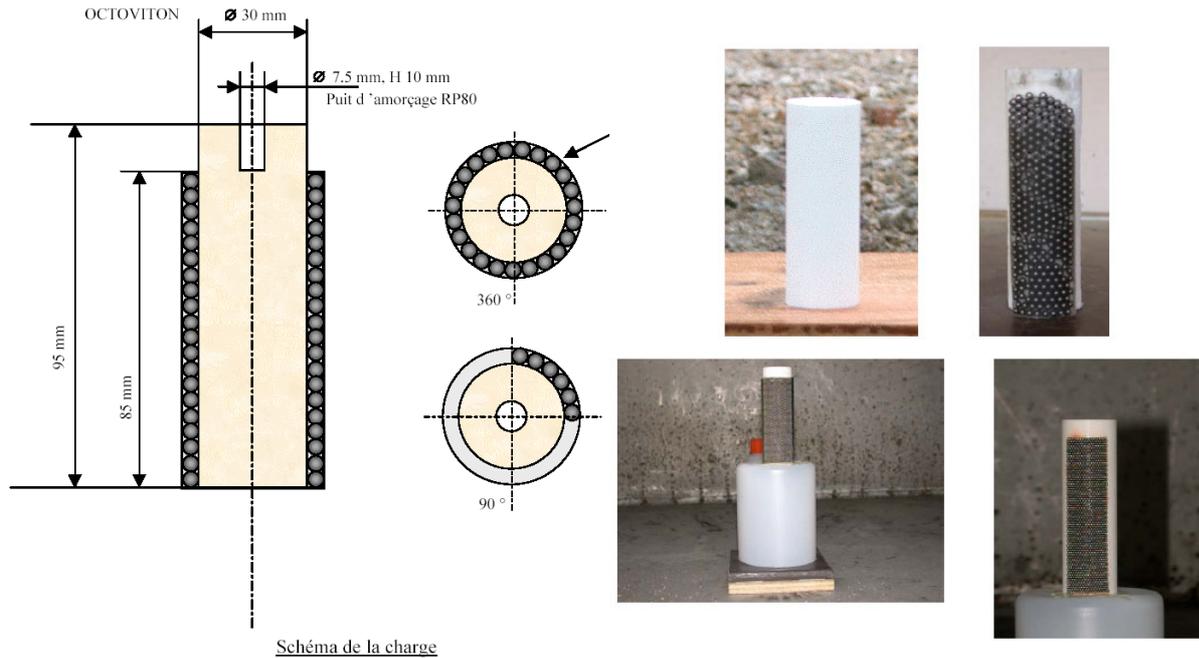


Figure 13 Schéma en coupe et photographies de la charge explosive à billes utilisées lors des expérimentations dites « bunker » - billes de 1,5 ou 3 mm de diamètre

Le type de charge utilisé dépend de la disposition des conteneurs de produit dans le bunker. En effet, pour simuler les conteneurs réels, cinq bidons de 0,5 litres sont répartis dans l'enceinte. La masse totale d'agent liquide entreposé est alors de l'ordre de 2,5 kg.

Deux configurations ont été ici retenues :

- Bidons alignés le long d'une paroi (figure 14b). Dans ce cas, on utilise la charge explosive ayant seulement un secteur angulaire de 90° recouvert de billes, afin de préserver par ailleurs la métrologie mise en œuvre.
- Bidons disposés autour de la charge, tous les 72°, à une distance de 300 mm de l'axe de la charge (figures 14c et d). Dans ce cas, la charge entièrement recouverte de billes est utilisée.

Les cinq bidons cibles sont en plastique, de hauteur totale 140 mm. L'épaisseur de la paroi est de l'ordre de 1 mm dans la partie centrale du bidon.

Le scénario ainsi recréé possède beaucoup de degrés de liberté. Il est en effet difficile de prendre en considération l'ensemble des paramètres qui régissent a priori le comportement du système étudié: point de détonation de la charge, angle d'incidence de la charge, masse d'agents stockés, position des bidons, etc.



Figure 14 Vues des deux dispositions initiales étudiées – en haut, alignement des containers le long d'un mur
- en bas, disposition concentrique.

En résumé, le champ d'investigation étant vaste, nous avons limité le nombre de cas étudiés lors de cette première série d'expérimentations :

- La charge est placée verticalement, au milieu du bunker.
- La gerbe d'éclats créée est réaliste par rapport à l'échelle de l'expérience, mais seule une énergie cinétique à l'impact est reproduite.
- Un seul type d'explosif est utilisé. Un seul type de conteneur est considéré (bidons plastiques).
- La masse initiale de produits liquides est fixée.
- Seules deux répartitions des fûts dans l'enceinte sont considérées.

Dans un premier temps, les expérimentations ont été réalisées sur le site STE (Site Tirs et Eclats) du CEA, en plaçant dans le bunker des bidons remplis d'eau colorée. Après la première phase de tir, il a été décidé d'effectuer des expérimentations sur le camp de Mourmelon, en remplissant les cinq bidons avec du TMP (TriMéthylPhosphate), produit organophosphoré employé comme simulant non toxique de produits chimiques de guerre.

Le paragraphe suivant est tiré de la note de sécurité CEB sur l'utilisation du TMP [47] : « *Le tri méthyle phosphate est un composé phosphoré qui présente des caractéristiques physico-chimiques (volatilité, densité, tension de vapeur, viscosité) comparables à celle du toxique qu'il simule. Il est par contre infiniment moins toxique et son utilisation n'est pas limitée par la réglementation*

française. Il sert majoritairement comme **ignifugeant** dans les moyens de lutte contre l'incendie, mais a aussi des applications en tant qu'additif pour les huiles, carburants ou insecticides ainsi que dans la plasturgie». De plus, « Les conditions de son utilisation provoqueront sa dégradation thermique partielle ou totale. Il en résultera la présence d'oxydes phosphoriques qui se dégraderont eux même en acide phosphorique mais aussi en traces de différents produits tels que des composés aromatiques polycycliques peu substitués, des alcènes. En cas de dégradation partielle, il restera également du TMP».

Les principales caractéristiques physico-chimiques du TMP sont répertoriées ci-dessous :

▪ formule brute	C₃H₉O₄P
▪ masse volumique :	1,2144 g.cm⁻³
▪ tension de surface :	0,037 N.m⁻¹
▪ enthalpie de formation H _f	-1127,17 kJ.mol⁻¹
▪ température de vaporisation T _{vap}	466 K
▪ enthalpie de vaporisation H _{vap} :	329 kJ.mol⁻¹
▪ température critique T _{crit}	764 K

Ces premières campagnes avaient des objectifs multiples :

- connaître le « bruit de fond » généré par l'explosif seul, c'est à dire les effets thermomécaniques imputés à la charge seule ;
- tester le réalisme à échelle réduite du scénario : réalisme de la gerbe d'éclats simulée et du comportement des bidons cibles face à l'agression, et validité des hypothèses initiales ;
- identifier les conséquences globales de la présence d'un liquide inerte, (en l'occurrence de l'eau) ou réactif (du TMP).

Pour cela, le CEB et le CEA Gramat ont mis en œuvre plusieurs métrologies (voir Partie II et Annexe 2 pour une description détaillée des protocoles expérimentaux et des capteurs utilisés). Deux voies naturelles apparaissent comme nécessaires pour décrire finement le terme source (figures 15 et 16):

- qualifier les phénomènes se déroulant à l'intérieur du bunker, en termes de pression, température et identifier leurs chronologies,
- qualifier les rejets à la brèche du bunker, en termes de composition chimique, granulométrie, vitesse et durée d'éjection, ainsi que les conséquences en champ proche de l'installation.

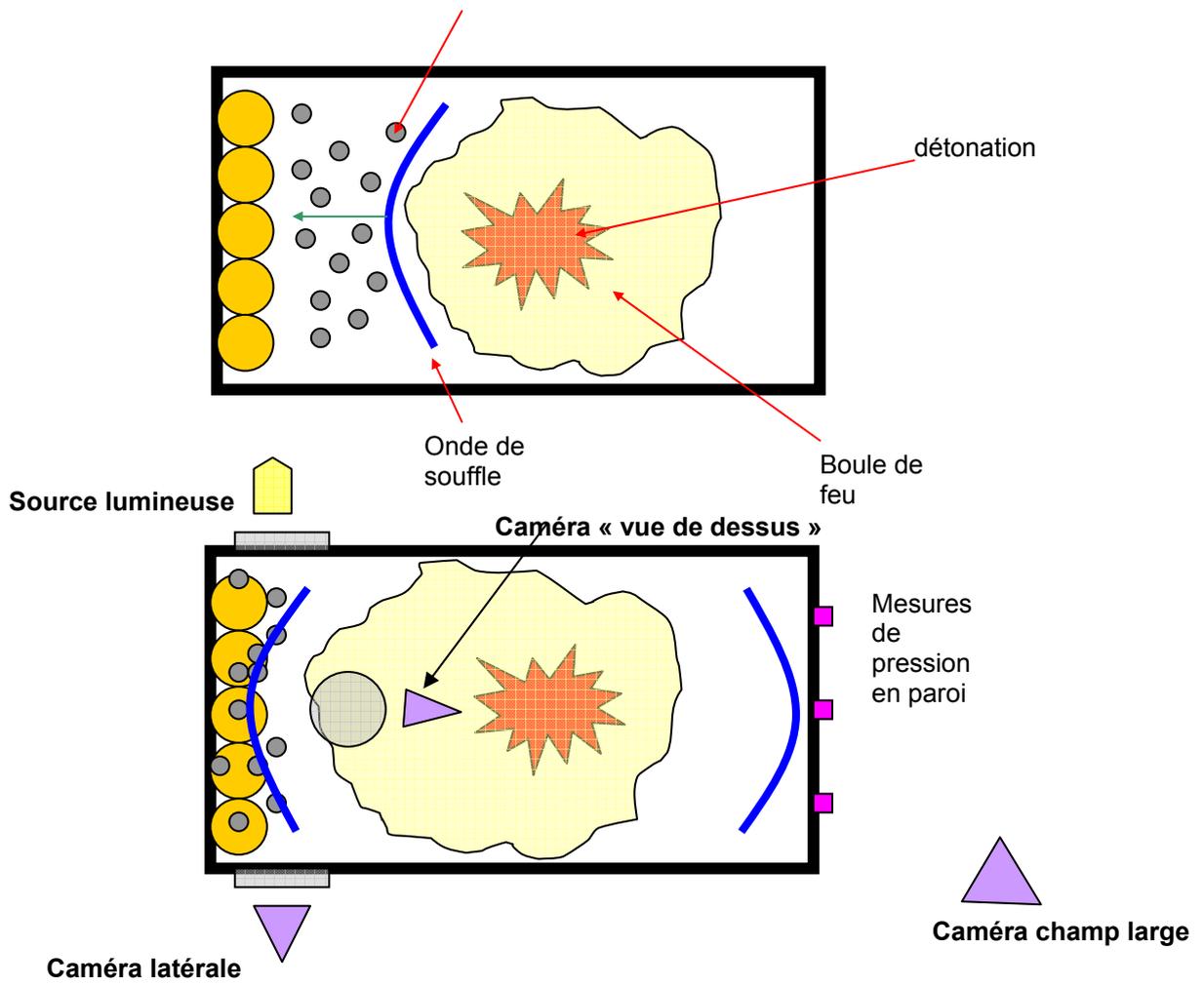


Figure 15 Schéma de l'expérimentation bunker et de l'implantation des moyens de mesure et de visualisation lors des tirs



Figure 16 Vue générale du dispositif expérimental lors des tirs réalisés sur le site de Mourmelon - dispositif de caractérisation du nuage éjecté du bunker

Les constatations principales de la première série d'expérimentations sont les suivantes :

Conditions thermodynamiques rencontrées par le liquide dispersé dans le bunker et générées par la détonation de la charge seule :

L'analyse dimensionnelle du problème a montré qu'il devrait y avoir invariance, quelle que soit l'échelle de l'installation, des variables P et T à l'équilibre. Les résultats obtenus et les constatations effectuées à l'échelle 1/8^e restent valable à pleine échelle.

- En ce qui concerne le champ de pression : En tout point de la pièce cible, la pression P est vue comme la superposition d'un terme évanescant lié à la propagation des ondes de choc et un terme quasi statique lié à la production de moles de gaz et à l'évolution thermodynamique du milieu.

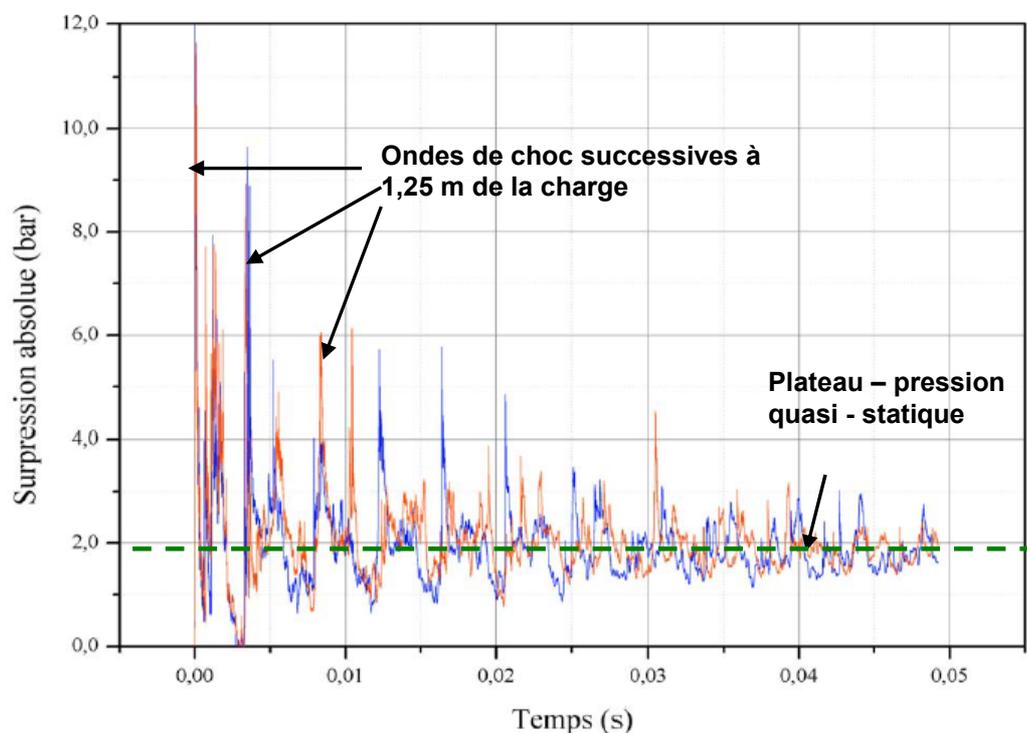


Figure 17 Exemple de signaux de pression mesurés lors de l'explosion de la charge à l'intérieur du bunker (3 capteurs) – effet de la charge seule sur les 50 premières ms de l'expérimentation

La première onde de choc arrive sur les récipients environ 900 μ s après la détonation de la charge et, dans le cas testé, 30 ms après la détonation la pression est quasi-homogène et vaut P_{qst} .

- En ce qui concerne le champ de température : les problèmes métrologiques rencontrés (utilisation de thermocouples à forte inertie) ne permettent pas une mesure fiable de la montée en température du milieu. Les premiers essais ont cependant mis en évidence un point important : si l'équilibre de pression est atteint après quelques dizaines de millisecondes, ce n'est pas le cas pour T. Le temps d'homogénéisation de la température est supérieur à la seconde. Ce dernier est difficile à estimer par le biais de ces seules expériences.

Comportement du produit liquide dispersé dans le bunker :

- Les containers à échelle 1/8^e ont un comportement macroscopique, en rupture, similaire aux bidons détruits lors d'expérimentations à échelle 1. De ce point de vue, les expérimentations dites « bunker » sont valides. La chaîne d'événements servant de base à l'étude est réaliste. Les ondes de choc qui se propagent dans la pièce mettent en mouvement les produits en présence ou en suspension mais n'ont, dans un premier temps, que peu d'influence sur les bidons de stockage (ces derniers sont mis en mouvement une fois le liquide dispersé). Ce point rejoint notamment les constatations faites à pleine échelle : la détonation d'une charge explosive de 40 kg, placée à 4 mètres d'un container cylindrique de 230 litres rempli d'eau, n'a pas de conséquence sur l'intégrité du bidon si celui-ci n'est pas percé préalablement. La quantité de mouvement cédée au stockage dans de telles conditions n'est pas non plus un critère dimensionnant,



Position initiale des bidons

Explosion de la charge (onde de choc, boule de feu et fragments en vol libre)

Impacts multiples sur les containers et libération du produit liquide

Figure 18 Impact de fragments et ouverture de bidons alignés

- Présence de produits inertes dans la cible : les bidons de stockages sont déchirés en face avant et sont mis en mouvement dans l'enceinte lorsque le liquide est dispersé dans la salle.

On constate la formation d'un nuage de vapeur, et de gouttes de diamètres 1 à 3 mm environ (pour celles qui sont visibles).

A l'issue du tir, une partie du liquide reste sur le sol et les parois, ainsi que sur les bidons de stockage, ce qui indique une expulsion partielle du produit et des changements de phase limités, induits par les champs de température et de pression.

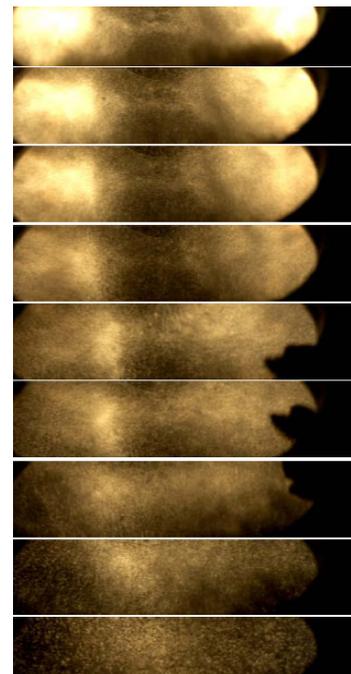


Figure 19 Visualisation à travers un hublot du bunker du nuage de gouttes en suspension dans l'enceinte de tir

- Présence de produits organophosphorés dans la cible : après un enchaînement identique, le TMP entre en combustion au contact des produits de détonation. Un haut et fort panache de gaz chaud est observé à la brèche du bunker (cf. paragraphe suivant). A l'issue, des résidus sont présents dans l'enceinte. Dans une configuration réelle, le site est pollué après l'explosion. Des échanges diffusifs et thermiques à long terme continuent de se dérouler entre le milieu ambiant et l'extérieur.



Figure 20 Etat résiduel de l'enceinte après essai et faciès d'ouverture des bidons en plastiques – on note la présence de liquide et de résidus noirs sur les parois

La position initiale du stockage par rapport au point de détonation est un facteur influent sur la violence des réactions chimiques (temps de mise en contact des espèces, temps d'initiation des réactions de combustion).

En ce qui concerne les résultats de mesure de température dans l'enceinte au cours de l'essai :

Les figures 21 et 22 présentent les températures maximales affichées et les temps de montées de température pour chaque expérimentation. Les tirs numérotés 02_04 et 03_04 correspondent à des essais avec de l'explosif seul. Les tirs 05_04 et 06_04 sont des tirs de destruction de bidons remplis d'eau. Enfin, les tirs 04_05 à 08_05 correspondent aux essais avec du TMP.

- Tout d'abord, compte tenu des inconnues du système de mesure (inertie des thermocouples), on peut considérer que les résultats sont reproductibles en terme de température maximale et de temps de montée t_m à cette valeur.
- t_m est de l'ordre de 2 secondes lorsque que les bidons de TMP sont disposés le long d'une paroi latérale, à 1,25 m de la charge. t_m prend par contre des valeurs proches de 500 ms lorsque les bidons sont près de la charge explosive (soit 30 cm – tirs 06_05 à 08_05).

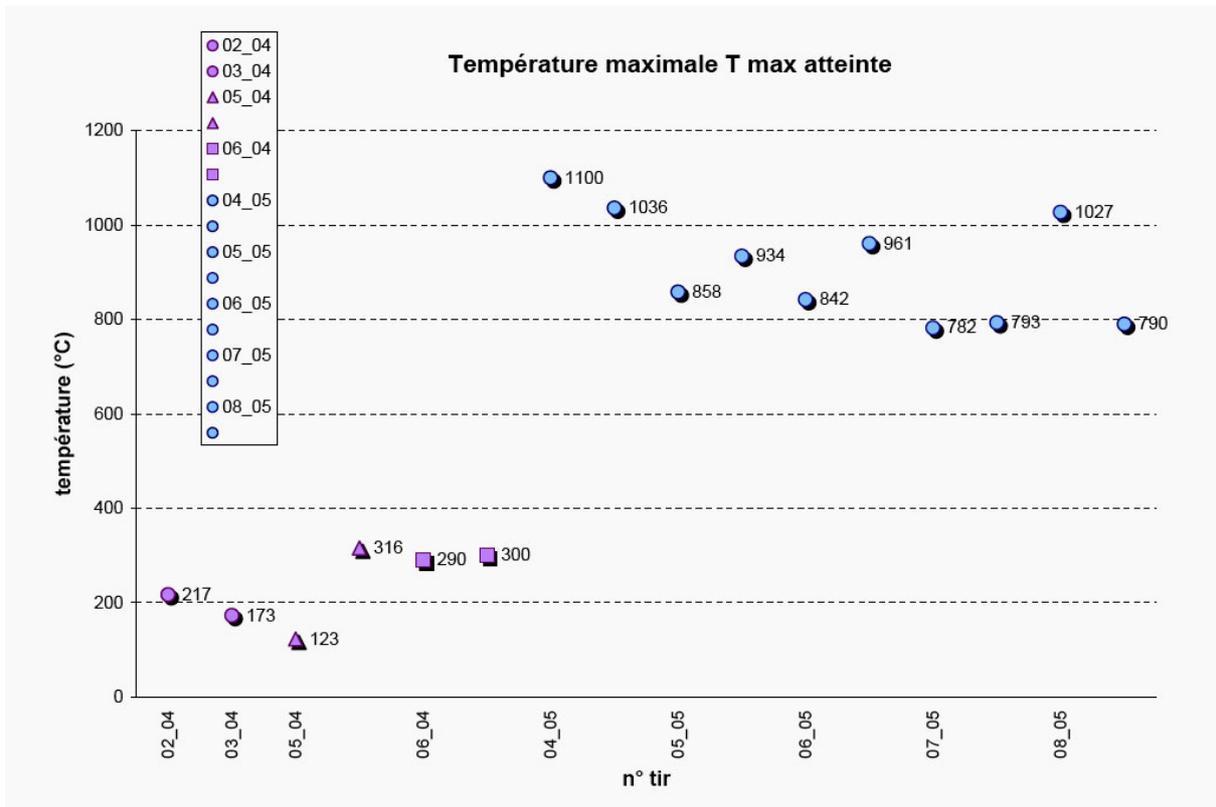


Figure 21 Température maximale (mesurée par thermocouples de type K en 2 points) atteinte dans le volume d'étude – en violet tirs inertes, en bleu, tirs avec du TMP

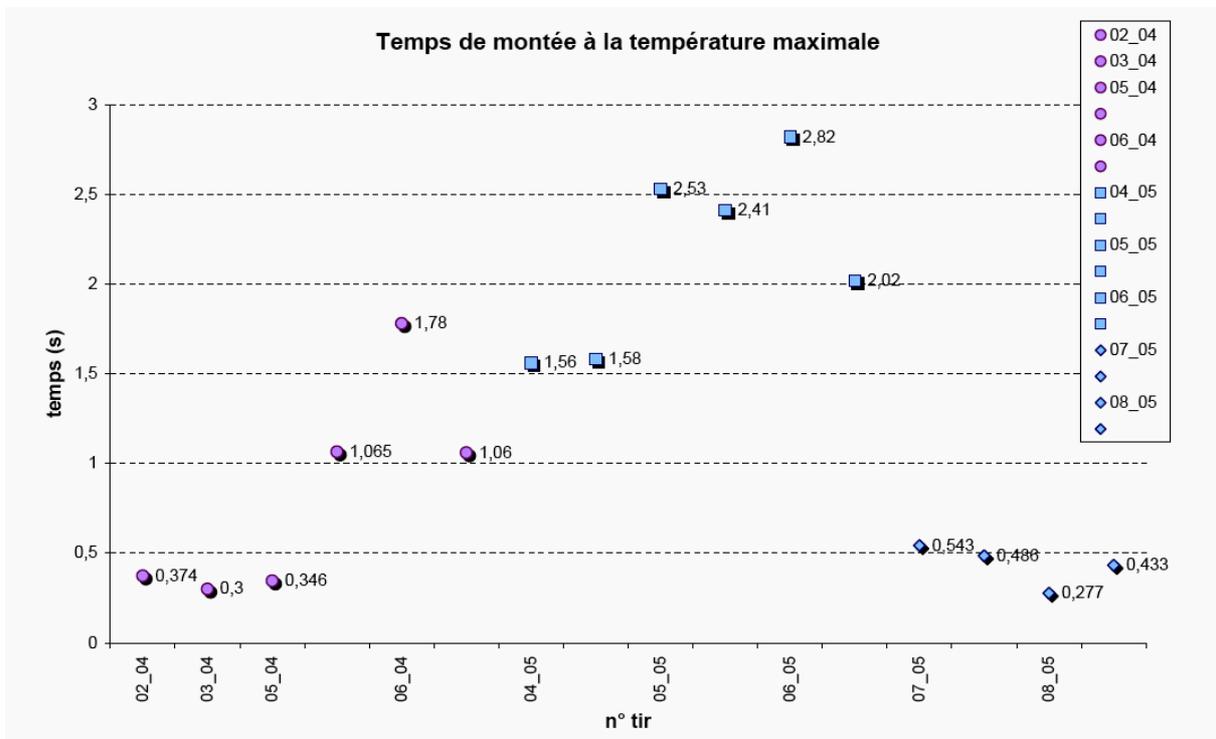


Figure 22 Temps de montée à T max (mesurée par thermocouples de type K en 2 points) – en violet tirs inertes, en bleu, tirs avec du TMP

Observation du débit de mélange à la brèche du bunker :

- Cas d'un liquide inerte (eau) : une fraction difficilement estimable de la quantité initiale est expulsée du bunker sous forme vapeur ou de gouttelettes. Le panache n'est visible que dans les premiers instants. L'expulsion n'est ici pas entretenue. La montée puis la chute en pression de l'enceinte est uniquement due à la détonation de la charge et des échanges entre phases. La vidange s'arrête quand la pression interne est égale à la pression extérieure.
- Cas du TMP, produit organophosphoré : le panache visible au niveau de la brèche est ici entretenu par la combustion interne du produit. On observe un jet chaud (température supérieure à 600 K), et rapide (supersonique au niveau de la brèche puis à 1 mètre au-dessus du bunker, vitesse de jet de l'ordre de 100 m/s). Ce jet traverse les couches d'air basses et modifie l'écoulement de l'air dans l'environnement proche de la cible. Le jet atteint 12 mètres de hauteur.
- A l'échelle des temps qui nous intéressent, le rejet n'apparaît qu'après établissement de conditions génératrices (en P et T) à l'intérieur de l'enceinte (i.e. on peut estimer que les phénomènes rapides en début de chaîne ont eu le temps de se dérouler avant que cela ne se traduise à la sortie du bunker).
- Ces différents points sont particulièrement importants et donnent du crédit à la modélisation du terme source. En effet, les codes de dispersion actuels ne peuvent prendre en compte un tel comportement et sont dotés de modèles simples de type bouffée ou source ponctuelle instantanée. Basés sur les équations de la mécanique des fluides, ces codes réalisent le « transport » de l'agent libéré. Ils ne prennent notamment pas en compte les effets de la libération dynamique du produit. Or, les expérimentations ont clairement montré que le rejet, porté à haute température, et animé d'une vitesse supérieure à 100 m/s, a une influence directe sur le milieu environnant et perturbe localement l'écoulement ambiant. De plus, ces résultats sont en accord avec les constatations de Seebaugh [17] qui évoque, selon le produit stocké et le diamètre de la brèche, des jets chauds ayant une vitesse comprise entre 85 et 450 m/s,



Figure 23 Visualisation par caméra rapide de l'éjection de produits à travers la brèche du bunker – panache de fumée diphasique

- L'utilisation d'une caméra infrarouge Orion (figure 24) permet de corroborer les informations ci-dessus (matrice utile de 128 par 128 pixels, pour une résolution de 40 mK en basse température, et une fréquence d'enregistrement de 300 Hz) : à 40 cm de la brèche, la température du panache atteint, 200 ms après détonation de la charge, une valeur stable de 500 K à 50 cm au dessus de l'ouverture, et 630K proche de l'évent. A une hauteur de 1,5 mètre, la température du cœur du jet est proche de 380 K. Les vitesses instantanées du nuage expulsé, encadrées grâce à la caméra IR, sont similaires aux résultats obtenus dans le spectre visible : à 5 mètres de la brèche, la vitesse de la phase expulsée est de l'ordre de 16 m/s.

La durée du jet est de l'ordre de 10 secondes (à l'échelle 1/8^e).

Il faut cependant rappeler que ces résultats sont obtenus à échelle 1/8^e. D'après l'analyse dimensionnelle, il y a invariance à échelle 1 de la pression et de la température (quasi statiques). Quelle que soit l'échelle, le bunker peut donc être vu comme un réservoir porté à des conditions génératrices données et se vidangeant dans un autre réservoir, de dimension infinie, à pression et température ambiantes. Ce qui change par contre, en fonction de l'échelle d'observation, ce sont les dimensions de la brèche et donc le débit de produits. La cinétique de vidange ne peut pas être transportée telle quelle à échelle 1. Mais les remarques précédentes resteraient valables : la température du rejet et sa violence sont supérieures à ce qui est communément modélisé dans les codes de dispersion actuels.

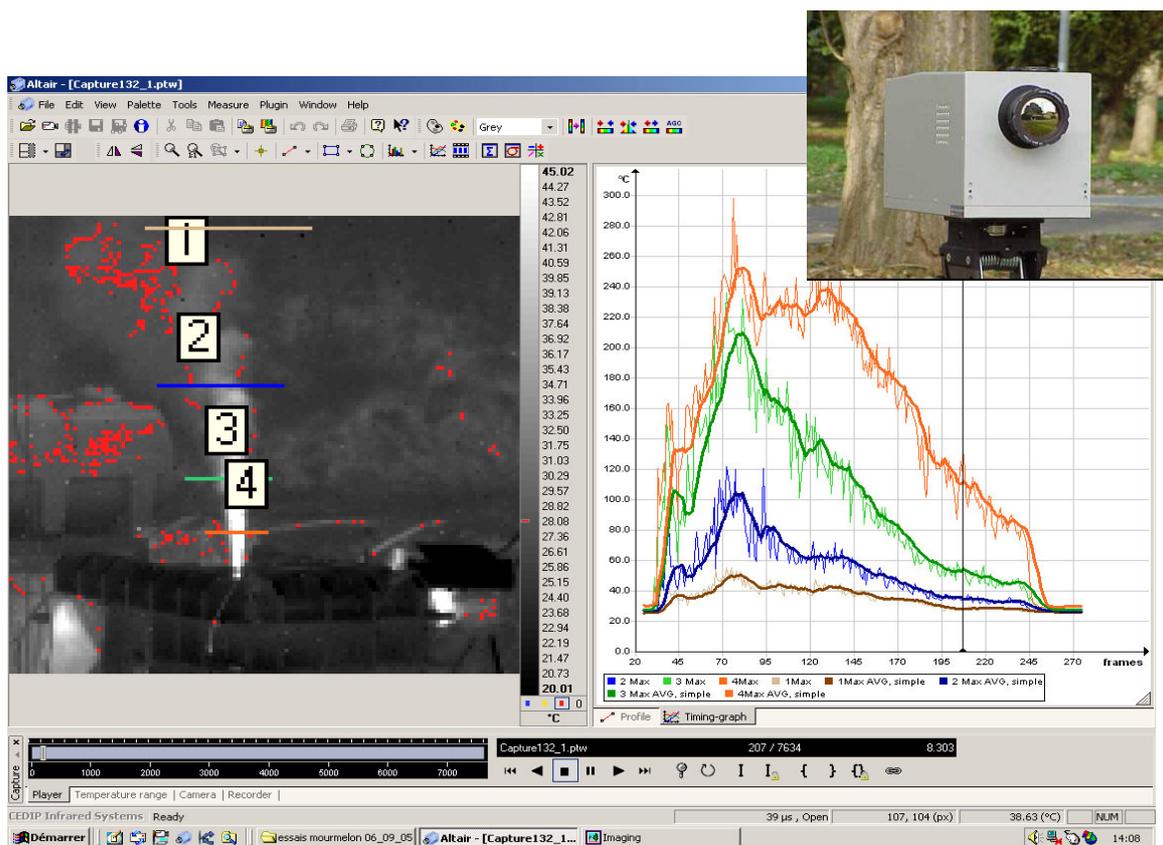


Figure 24 Variations temporelles de la température moyenne apparente du jet, pour 4 altitudes (en haut à droite, vue de la caméra IR Orion placée à 100 mètres du bunker)

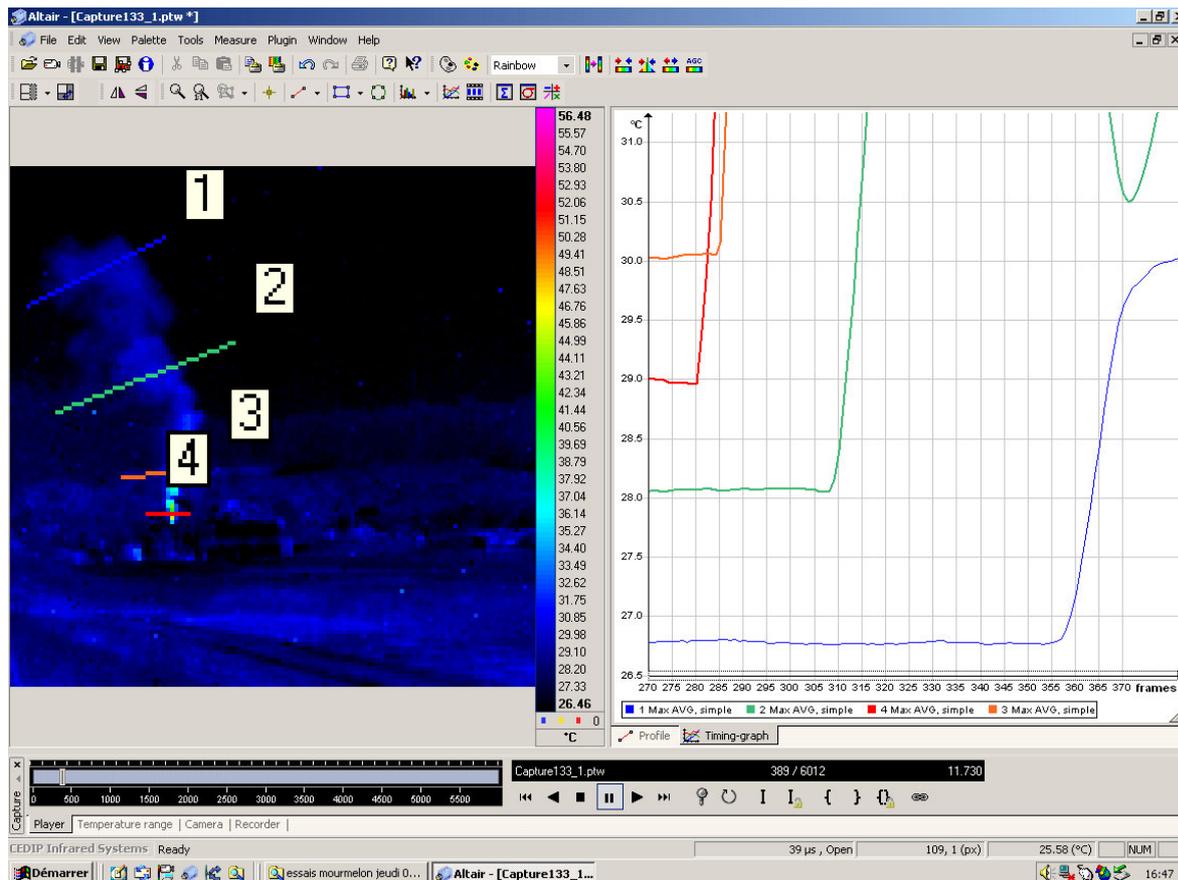


Figure 25 Estimation de la vitesse du rejet : relevé du temps d'arrivée du jet le long de quatre niveaux de coupe, par caméra IR (détection de l'arrivée du panache chaud par augmentation brutale du signal)

Analyse temporelle des évènements internes et externes au bunker

Les expérimentations ont montré que plusieurs évènements se chevauchent, et que l'état résiduel de la chambre de tir dépend fortement de la séquence de ces évènements. L'analyse des séquences vidéo, comparées aux résultats des mesures de surpression interne, permet de dresser une chronologie moyenne des évènements.

En effet,

- Selon la configuration de tir choisie, les durées relatives des phases sont reproductibles. Le protocole expérimental est en ce point valide, permettant une interprétation fiable de la chaîne des phénomènes observés.
- Quelle que soit la configuration initiale, une première expulsion de gaz chaud, attribuée à la détonation seule de l'explosif est observable 5 ms après la détonation de l'arme.
- Le débit de fumée visible cesse entre 7 et 11 secondes après la détonation de l'arme. Le délai est plus long lorsque les bidons sont disposés à 360° autour de la charge (la mise en contact des produits étant améliorée, la combustion est *a priori* plus complète dans ce cas).

- Dans le même ordre d'idée, lorsque les bidons sont disposés autour de la charge, le panache de fumée visible à l'extérieur se produit plus tôt : la combustion du TMP démarre plus facilement.

Ces remarques sont à mettre en parallèle avec les mesures de pression interne. Les figures 26 et 27 montrent les courbes obtenues lors d'un essai avec du TMP.

La courbe 27 est le résultat du filtrage basse fréquence des signaux obtenus (voir annexe B). A partir de P_{qst} , la pression interne augmente et traduit la combustion du TMP : l'augmentation de pression débute à t_{ac} (temps de début de combustion), atteint ensuite une valeur maximale au temps $t_{m, p}$ (comme temps de montée en pression), puis retourne à pression ambiante au temps t_v (temps de vidange).

La surpression maximale atteinte est ici de l'ordre de 3,2 bars. Elle est le fruit de l'équilibre entre la production de produits gazeux et l'expulsion brutale des fumées dans l'atmosphère.

Les valeurs de ces différents paramètres sont répertoriées sur les figures 28 et 29. Ces graphiques permettent d'illustrer la reproductibilité du scénario (séquençage) et les nuances apportées par les conditions initiales des expériences.

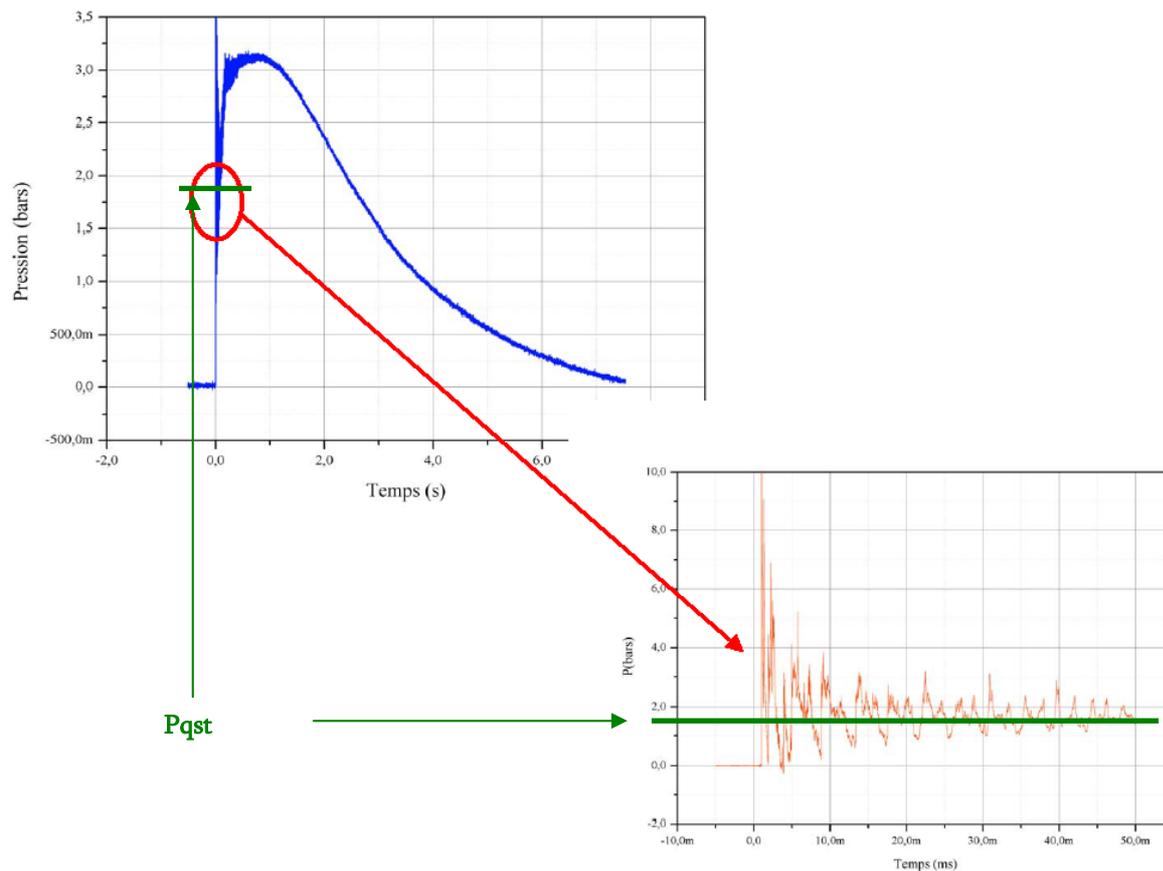


Figure 26 Exemples de signaux de surpression interne au bunker – en bleu, signal sur 7 s, couvrant l'ensemble du processus – en rouge, variation de pression due à la détonation de la charge explosive, sur les 50 premières ms.

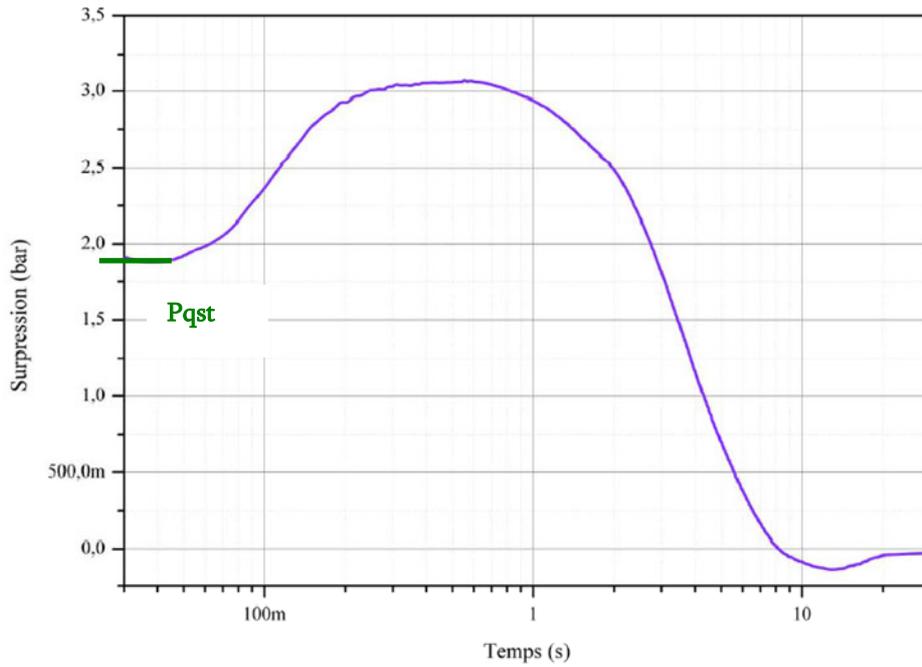


Figure 27 Evolution de la surpression interne depuis l'établissement de Pqst jusqu'à Tv – retour à la pression ambiante – échelle logarithmique

Observations macroscopiques - tirs avec TMP

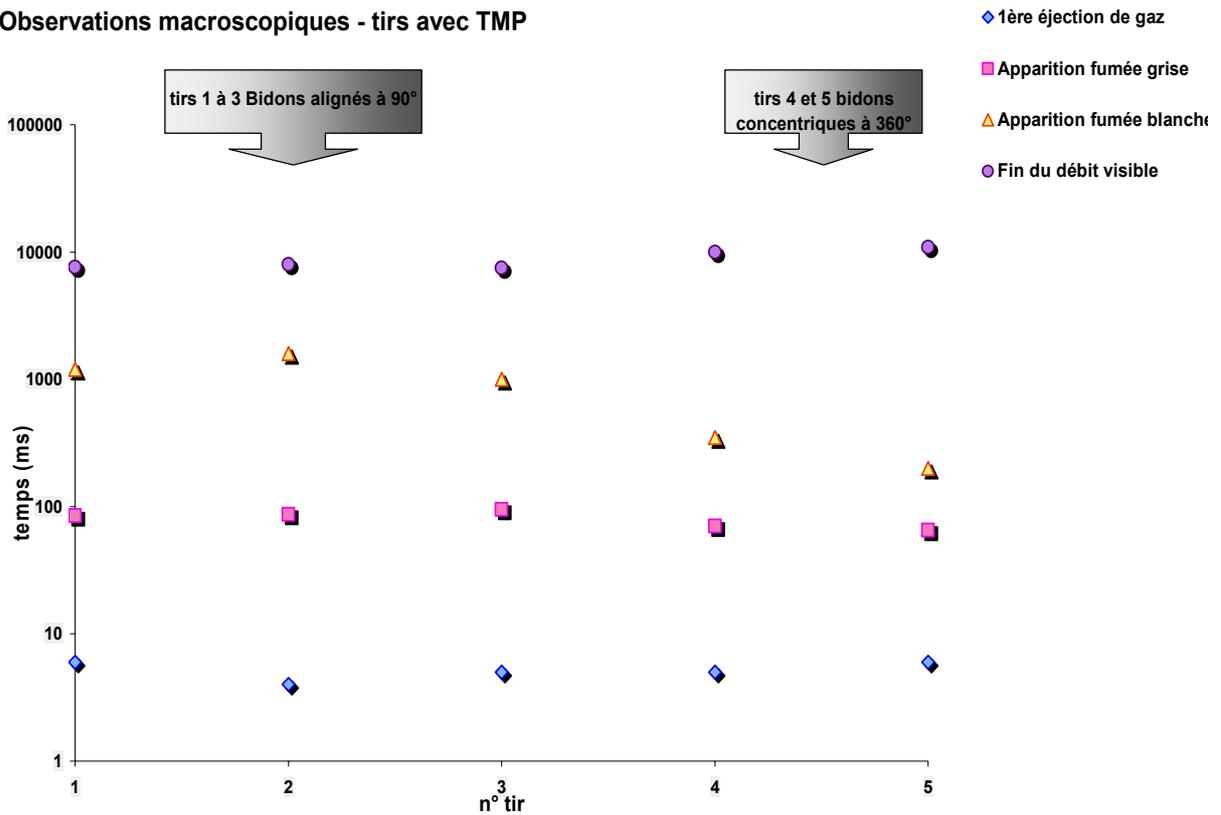


Figure 28 Tirs avec du TMP - Relevé visuel des temps d'apparition des événements des phénomènes

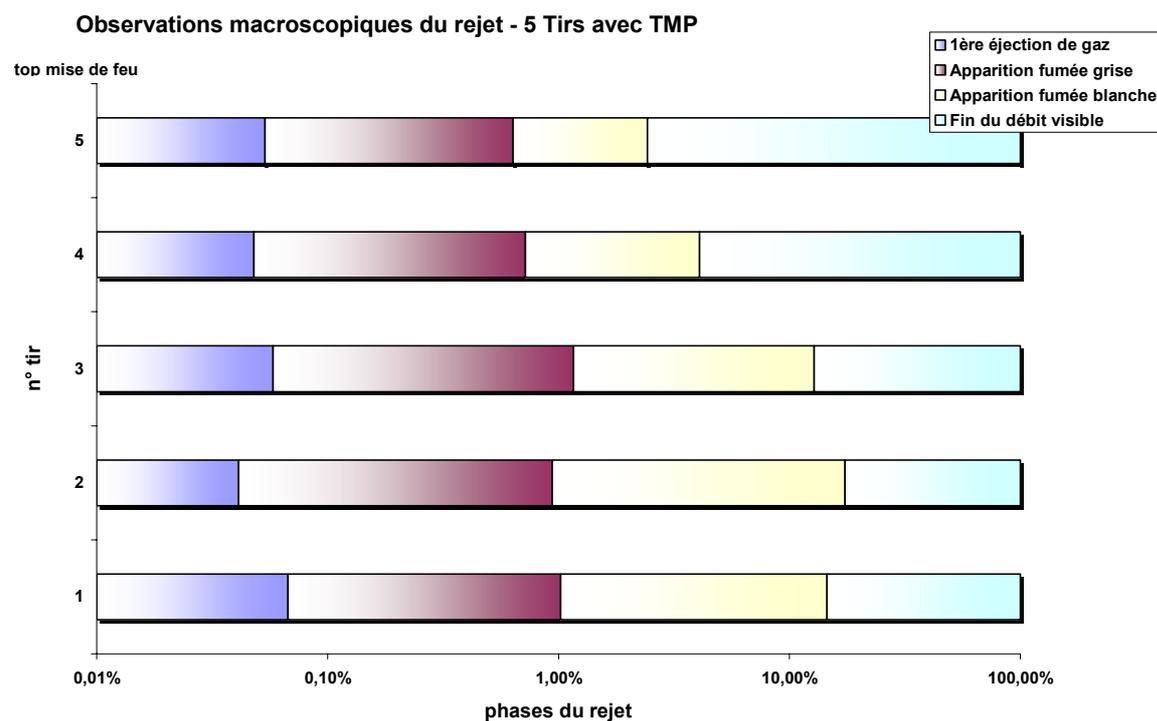
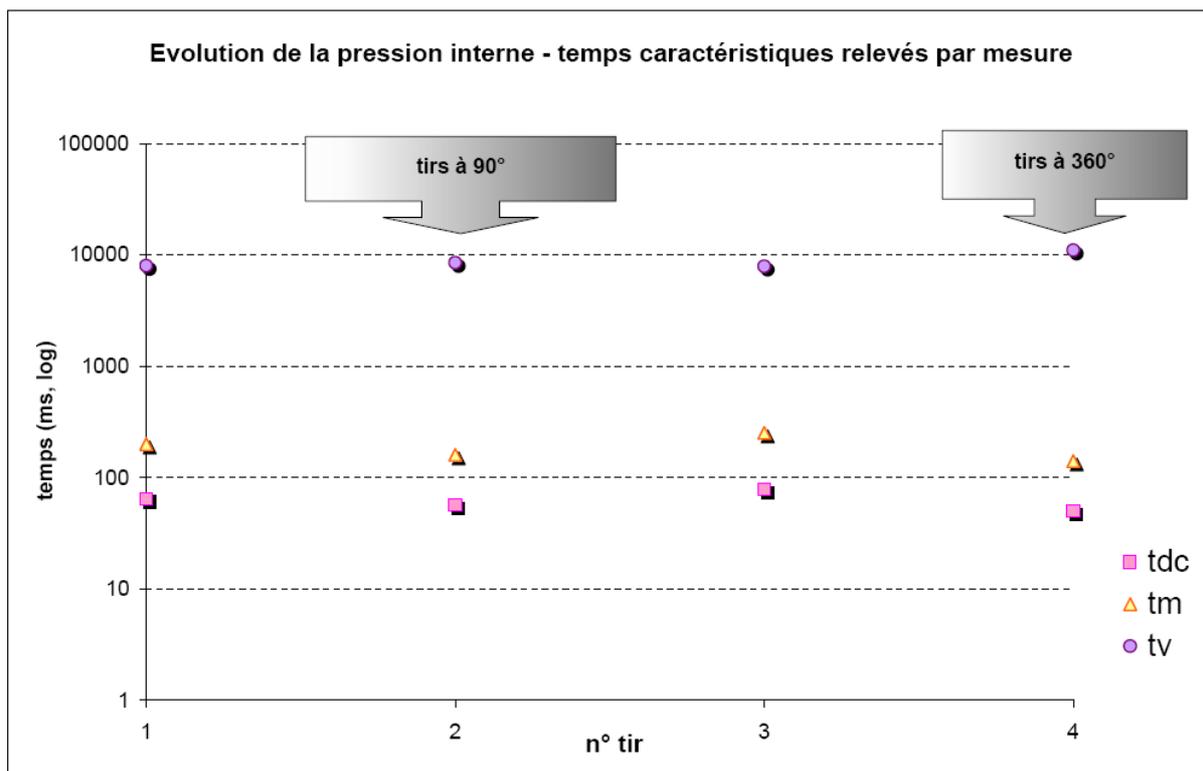


Figure 29 Tirs en présence de TMP – temps caractéristiques de la combustion des produits en présence et du rejet à la brèche – tdc : temps de début de combustion – tm : temps de montée à la pression maximale – tv : temps de vidange (retour à pression ambiante). En bas, représentation sur une même base de temps des durées relatives des phases pour les 5 tirs avec du TMP

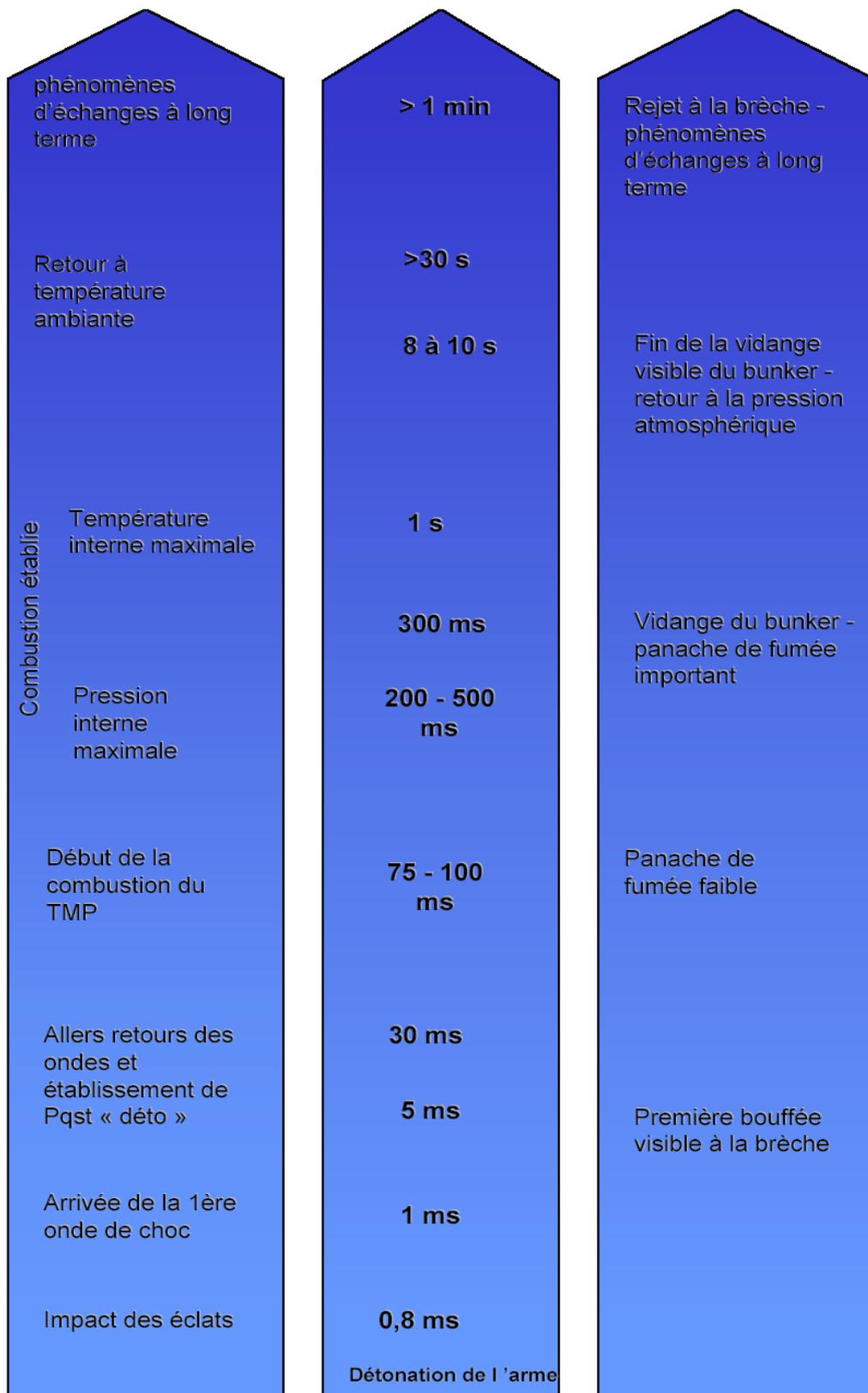


Figure 30 Résumé des phases observées conduisant à la formation d'un nuage – expérimentations à échelle 1/8^e

En conclusion.

Les constatations ci-dessus forment une conclusion clef des premières expérimentations : dans la perspective d'un calcul de dispersion, le terme source d'un tel évènement ne peut être modélisé par une libération ponctuelle de produit et/ou de dose : il s'agit d'une libération étendue dans le temps, par le biais d'un écoulement chaud ayant une influence directe sur l'environnement proche de la cible. Les calculs de dispersion doivent tenir compte de ce fait et gérer de manière satisfaisante l'interface entre le terme source et la phase de transport du produit libéré.

Les couplages des phénomènes, observés expérimentalement, rendent nécessaires :

- Une modélisation instationnaire de l'évolution de la pression dans la pièce et des échanges thermiques induits par la détonation de la charge explosive,
- Une modélisation instationnaire de la libération de la phase liquide dans l'enceinte (aérosols, gouttes, vidanges de type Bernoulli), ou une modélisation statistique de la taille des éléments fluides éjectés,
- Une modélisation instationnaire des transferts couplés de masse et d'énergie entre la phase liquide et la phase gazeuse en présence (délai de chauffage, évaporation...) et prise en compte d'éventuelles réactions chimiques à haute pression et haute température (réactions de combustion, dégradation du produit initial...),
- Et enfin, une modélisation instationnaire des rejets à la brèche (débit, température, composition du panache).

Les propriétés physico-chimiques des produits stockés sont un point clef du problème. Les données telles que la tension de surface du liquide, la viscosité, les températures ou enthalpies de changement de phase, ainsi que les cinétiques complètes de décomposition sous haute pression et haute température sont essentielles à la compréhension des phénomènes et à la connaissance fine du rejet dans l'atmosphère.

I.3 Explosion par impact d'un réservoir de liquide à pression ambiante

Comme nous l'avons déjà indiqué, la génération de la phase liquide par explosion de réservoir a fait l'objet d'une étude particulière, menée en parallèle de cette thèse. Seule la méthodologie suivie est évoquée ici. De nombreuses expérimentations, dites unitaires, ont été réalisées pour étudier l'impact de différents fragments sur des conteneurs métalliques.

Le type de produit stocké a également varié (tension superficielle et viscosité). Les produits utilisés sont de l'eau ou des solutions ammoniacales, elles-mêmes différenciées par l'introduction de polyéthylène glycol afin de faire varier les propriétés physiques du liquide.

L'ouverture du conteneur sous l'impact d'un fragment a été observée grâce à des moyens vidéo ultrarapides. Une visualisation par ombroscopie du contenu du container et du comportement du projectile a permis de relier l'énergie cinétique à l'impact, la décélération du fragment et le niveau de pression induit dans le réservoir.

L'utilisation de capteurs de pression immergés a également permis de mesurer le coup de bélier hydraulique selon la configuration du système {container + liquide + énergie du projectile}.

La particularité de cette étude est de faire le lien entre le type d'agression et la quantification du terme source « liquide ». En effet, dans les configurations étudiées, la totalité du volume liquide subit les effets de la pression (onde de choc, mise en vitesse), contrairement au cas des stockages de très grande capacité sur lesquels l'agression peut avoir des effets plus ou moins localisés. Ceci renforce les spécificités de l'étude.

Pour résumer, les expérimentations ont permis de répondre aux questions suivantes :

- Quel est le lien entre le niveau d'agression et la topologie de la phase liquide éjectée de la cible ?
- Quels sont les transferts d'énergie au sein du système {projectile + cible} ?
- Quel est l'état résiduel de la cible après agression ?

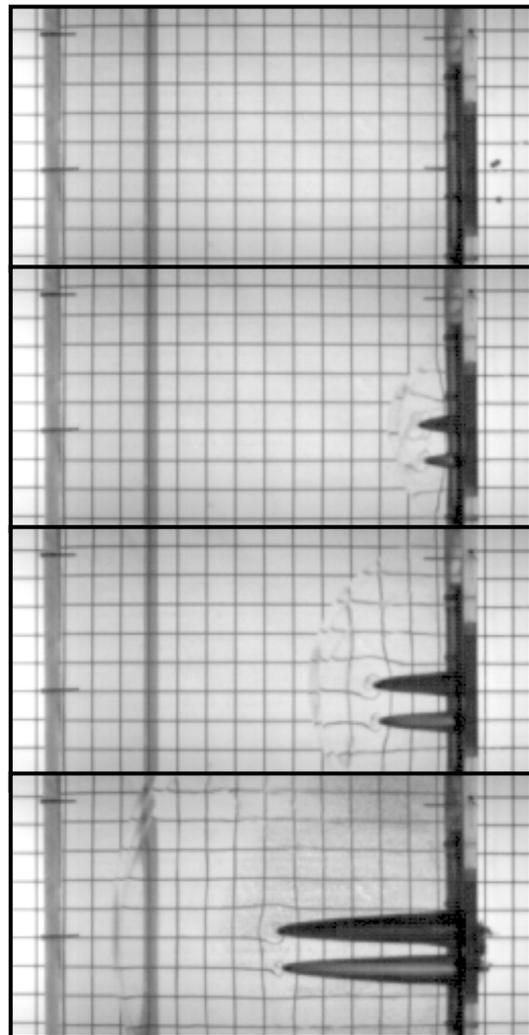


Figure 31 Visualisation du sillage de 3 projectiles sphériques dans un réservoir et coup de bélier hydraulique

Le deuxième objectif de ces expérimentations est de fournir sur des cas « simples », un ensemble de données physiques directement exploitables pour valider les travaux de simulation multiphasique et d'élaborer, à partir des constatations précédentes, des modèles analytiques robustes du terme source « éjection de liquide ».

Il s'agissait donc d'élaborer et de réaliser des cas expérimentaux simples, avec un nombre limité de paramètres.

Les modèles physiques et analytiques permettant de restituer les transferts d'énergie, sont basés sur une analyse de type [niveau x temps caractéristiques], et sur une analyse dimensionnelle du problème : nombres de cavitation K , de Reynolds Re , de Weber We , etc.

Plus précisément, l'éjection dynamique du liquide a fait l'objet d'une analyse approfondie en termes de vitesse et comportement macroscopique de la phase condensée. Deux types d'agression ont été simulés expérimentalement : tout d'abord un fragment seul, puis une agression couplée fragment / onde de choc, afin de recréer les conditions réelles de fonctionnement d'une charge explosive (figure 32).

L'utilisation d'un logiciel de traitement d'image a permis, en fonction du type de produit liquide stocké, de connaître un encadrement de la taille et de la vitesse des particules liquides éjectées. Des modèles mathématiques ont également été élaborés afin de quantifier la fragmentation de la phase liquide due au passage d'une onde de choc aérienne [28 à 31].

L'analyse des enregistrements vidéo s'effectue par le traitement eulérien ou lagrangien de sous-parties du jet, au cours des différentes phases d'éjection identifiées (zones bleues, figure 33). Les vecteurs « vitesses » moyens du jet sont également recherchés. Compte tenu du nombre important de données à traiter (plus de 100 000 images par essais), une méthodologie a été mise au point afin de déterminer la taille utile et le nombre d'échantillons (d'images) strictement nécessaires pour obtenir les encadrements souhaités avec une précision suffisante et sans perte d'information.

Même s'il s'agit ici d'un traitement 2D d'un problème 3D, les informations récoltées permettent de limiter le champ d'étude.

Au final, la phase liquide dispersée dans le milieu est connue au cours du temps en termes de débit massique, vitesse et taille de particules (figures 34 et 35). Elle se présente sous la forme de trois topologies principales :

- des fines gouttelettes (aérosols), produits par la fragmentation du jet primaire à haute énergie et par fragmentation secondaire du jet liquide (par onde de choc),
- de gouttes de quelques millimètres de diamètre,
- ou d'une nappe répandue au sol (vidange classique type Bernoulli du réservoir).

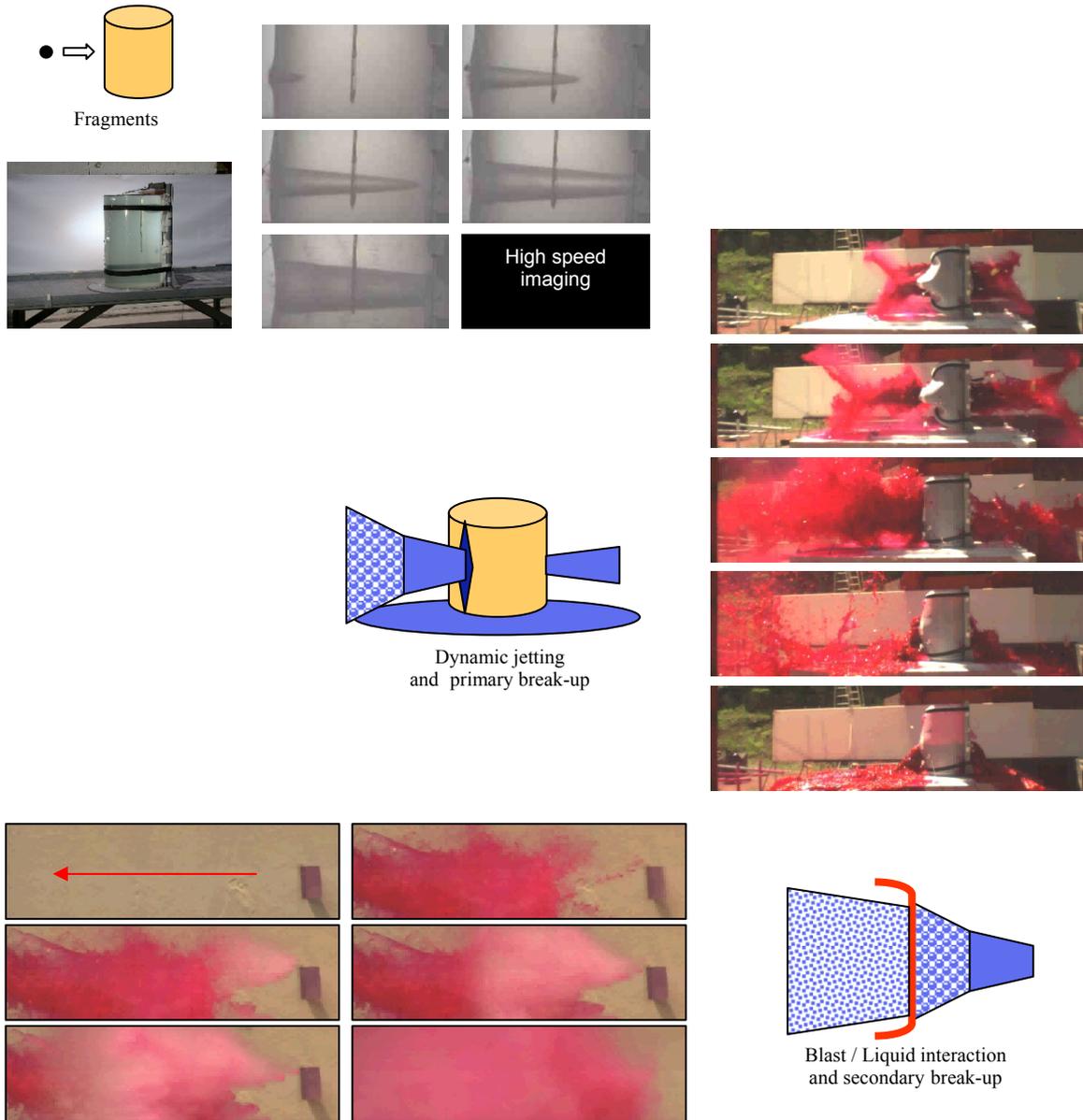


Figure 32 Schémas illustrant les expérimentations réalisées afin de déterminer la topologie de la phase liquide éjectée – en haut : expérimentation de coup de bélier dans un fût transparent – milieu, visualisation du « volume » occupé par la phase éjectée – en bas, focus sur l’effet du passage d’une onde de choc sur un nuage en suspension (la flèche rouge indique le sens de propagation de l’onde de choc aérienne).

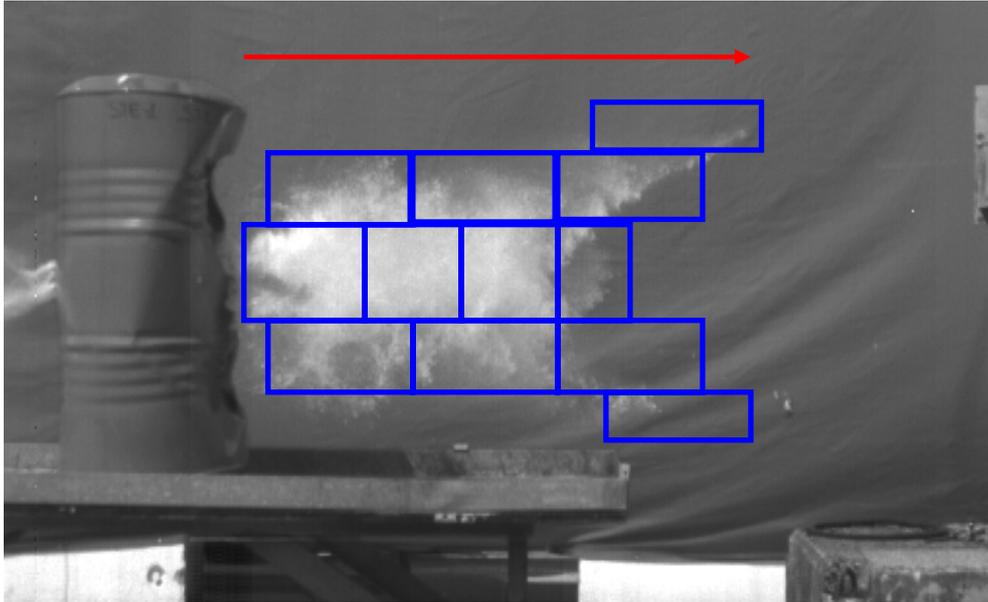


Figure 33 Jet dynamique issu de l'éclatement d'un réservoir - définition de zones d'intérêt (en bleu) selon la topologie du fluide - illustration de la longueur de pénétration du jet (en rouge)

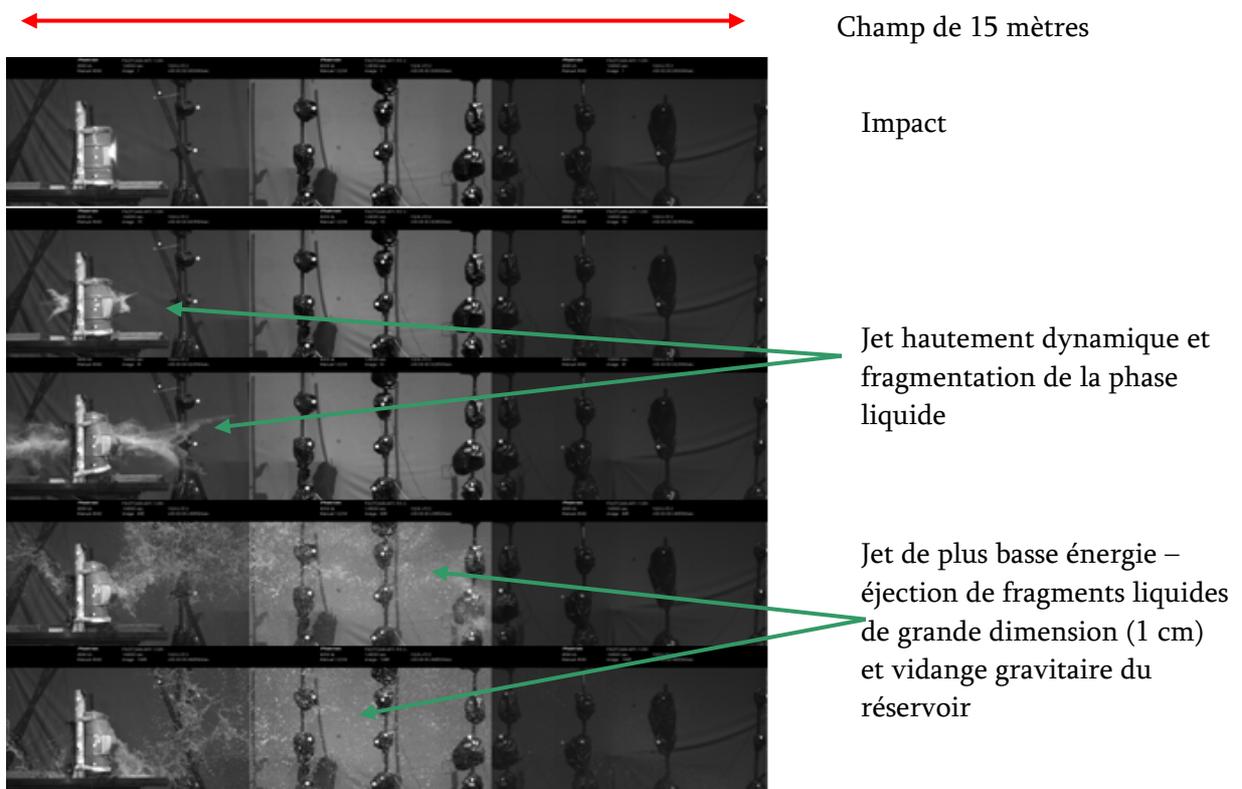


Figure 34 Phases d'éjection du liquide dans l'environnement proche du réservoir

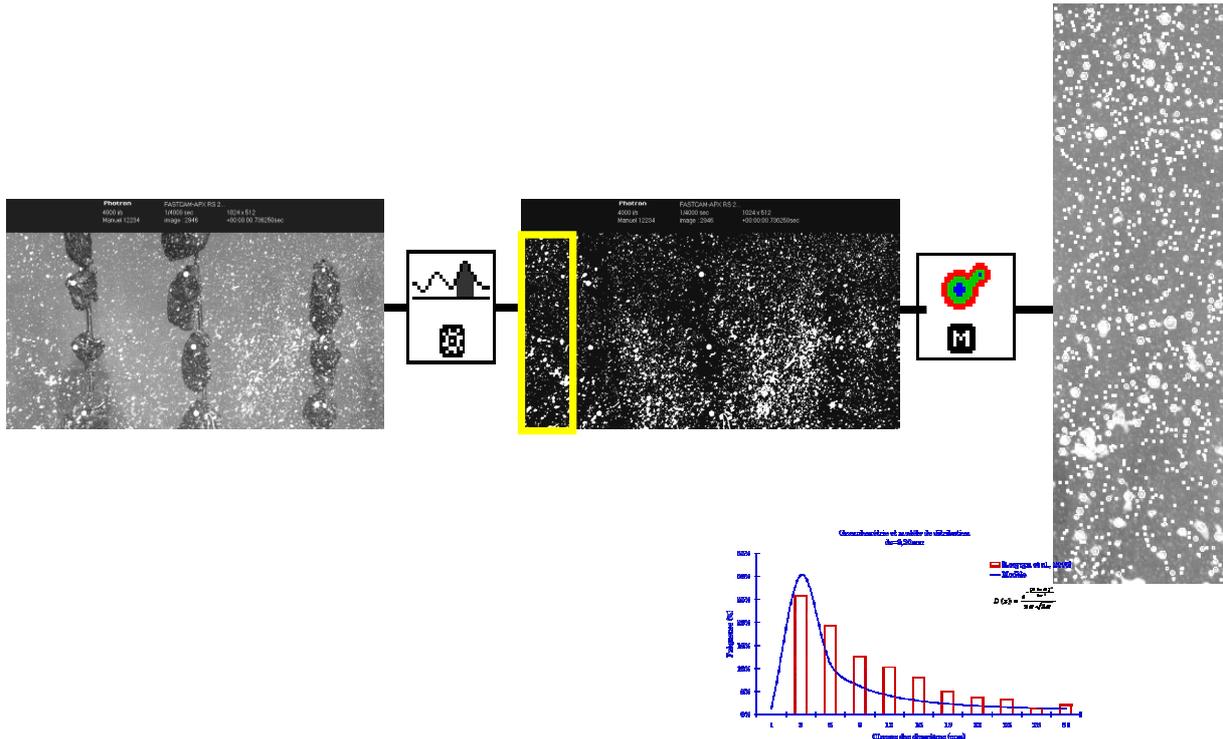


Figure 35 Sélection d'une zone d'intérêt et application d'opérations mathématiques de traitement – détermination du spectre caractéristique 2D de l'échantillon

Ces travaux expérimentaux sur un système complet ont été étoffés par une étude de la fragmentation de liquide sous choc. On ne citera ici que les résultats principaux d'une étude expérimentale et numérique réalisée dans le cadre de ce projet [34]. Des gouttes de plusieurs millimètres de diamètre ou un jet plein ont été soumis en tube à choc à une discontinuité de pression : l'utilisation d'un microscope à fort grossissement a permis d'observer des gouttes résiduelles en aval de l'onde de choc ayant un diamètre de l'ordre de 6 à 10 micromètres, pour des chocs d'intensité supérieure à 10 bars. De même, les expérimentations de fragmentation sous choc d'un jet plein montrent un spectre résiduel large, faisant apparaître des gouttes ayant un diamètre compris entre les valeurs ci-dessus et quelques millimètres.

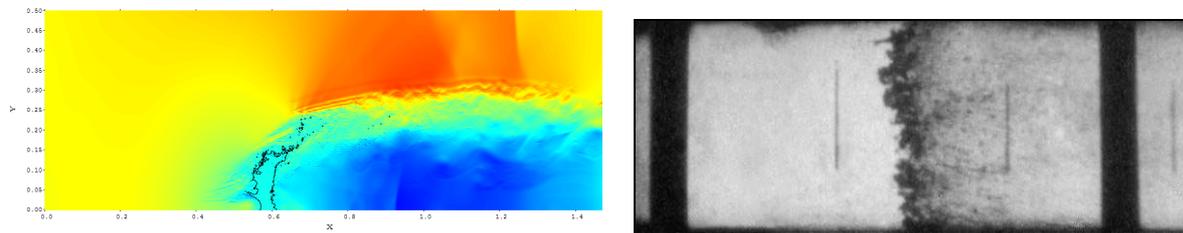


Figure 36 Simulations numériques et expérimentales de la fragmentation d'un liquide sous choc (le choc se propage de la gauche vers la droite) – A gauche, simulation par un code russe (VNIIEF) du champ de densité – on distingue en noir le contour de la goutte atomisée - A droite, mise en mouvement et fragmentation d'un jet plein sous choc (visualisation en tube à choc par ombroscopie)

On retiendra alors ici, que la phase liquide dispersée dans le volume d'étude (le « bunker »), peut se présenter de la façon suivante :

- un brouillard de très fines gouttelettes sphériques ayant un diamètre initial de 10 micromètres,
- un brouillard de gouttes sphériques ayant une répartition de diamètres sur 5 classes de 1 à 10 mm. Ceci est une hypothèse de travail réductrice, mais nécessaire pour tester la validité de nos modèles.
- une nappe liquide répartie sur tout ou partie de la surface au sol disponible.

Dans le premier cas, l'hypothèse se traduit par :

- un nombre de gouttelettes N_g de $1,9 \times 10^{12}$ par kilogramme de liquide (pour un liquide ayant une densité voisine de celle de l'eau) et une surface d'échange initiale avec la phase gaz de 600 m^2 par kg.

Pour un nuage de gouttes de 1 mm de diamètre, on obtient les résultats suivants :

$N_g = 1,9 \times 10^6$ et une surface initiale d'échange de 6 m^2

Ces hypothèses sont évidemment restrictives par rapport à la description spatiale faite dans ce paragraphe de l'explosion d'un réservoir sous impact, l'expulsion du liquide ayant un aspect transitoire. Plus particulièrement, on ne prend pas en compte les phénomènes de coalescence ou de fragmentation secondaire des gouttes dues à leurs interactions physiques ou avec les parois.

Le cas d'une distribution connue ou aléatoire de gouttes (figure 37), ainsi que la modélisation transitoire d'un jet pénétrant dans le volume d'étude seront également abordés dans le mémoire.

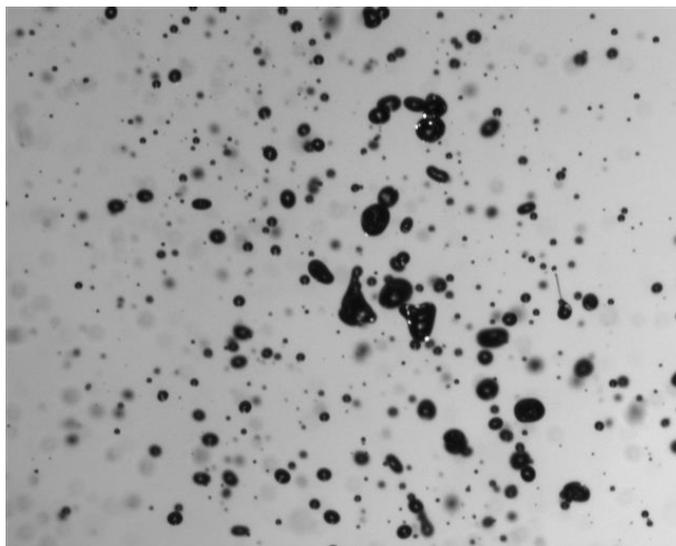


Figure 37 Nuage de gouttes quasi sphériques ayant un large spectre

I.4 Problématique scientifique / Modélisation multiphasique

I.4.1 Modélisation 0D instationnaire

Au final, le problème qu'il est demandé de modéliser est complexe et tridimensionnel. Quasiment tous les évènements successifs depuis la perforation des réservoirs jusqu'à l'évacuation brutale d'un mélange diphasique vers l'extérieur sont des sujets de recherche à part entière et comportent des difficultés de modélisation spécifiques. Ces difficultés s'amplifient en raison des forts couplages spatiotemporels entre les évènements. Aujourd'hui, comme le décrit S. Menon dans [23], rapport portant sur des travaux liés à un contexte équivalent, aucun outil de simulation ne permet de traiter finement l'ensemble de ces phénomènes physiques. Le mot « finement » a ici son importance et plusieurs sens, se rapportant à la fois aux objectifs de la simulation, et aux techniques sous-jacentes : pour simuler numériquement la combustion turbulente des produits de détonation d'un explosif, en présence d'ondes de choc, **des méthodes de type LES** (Large Eddy Simulation) peuvent être employées, mais sont à elles seules très coûteuses en temps de calcul, et demandent de connaître (de modéliser) avec une précision acceptable les phénomènes se déroulant aux petites échelles (incorporation implicite de la physique se déroulant aux échelles inférieures à celle du maillage).

Dans le même souci de développement d'outils de simulation performants, l'amélioration de codes numériques multiphasiques est continue et soutenue, en Europe notamment. On citera ici les travaux d'A. Milne [24 à 26], à l'aide des codes EDEN et PIC3D, respectivement dédiés à la simulation d'écoulement à plusieurs vitesses et pressions (i.e pour chaque phase en présence) et le comportement d'une phase diluée dans un écoulement porteur, avec ou sans transferts de masses (technique dite de **Particle In Cell**), qui permettent de traiter les scénarii évoqués sur une machine de puissance, mais nécessitent un temps de calcul non négligeable. En France, on citera les travaux de R. Saurel et al. [39 à 44], sur lesquels ce mémoire de thèse est basé, de développement de modèles physiques régissant un large éventail de situations multiphasiques et multi espèces. Les principes de développement décrits dans ces références s'appuient sur :

- Un formalisme qui se veut « universel » pour les problèmes à interfaces : **la modélisation par « interfaces diffuses »**,
- Une formulation multiphasique DEM (méthode des équations discrètes) permettant le traitement d'écoulements multi vitesses, multi températures en présence d'interfaces matérielles et perméables,
- Des réductions du modèle complet en modèles simplifiés selon les besoins, qui permettent d'intégrer de nouveaux phénomènes physiques de manière naturelle (compaction des poudres, effets de tension de surface, fragmentation des liquides, transferts de masse et de chaleur, etc.).

Parmi les phénomènes en cours de modélisation, on trouve :

- Les écoulements à N phases en déséquilibre de pression, vitesse et température, en présence de chocs,

- Les transferts de masse liquide / vapeur (notamment cavitation dans un contexte à N fluides, évaporation et condensation),
- Les transferts thermiques en milieu hétérogène (gaz / gouttes ou gaz / particules),
- La fragmentation de nappes, de jets et de gouttes.

Pour couvrir ce spectre d'études, il est nécessaire d'avoir recours à une suite de plusieurs codes car il est impossible de traiter l'ensemble avec un code unique. En effet, les échelles temporelles et spatiales des phénomènes à traiter sont très différentes, de l'échelle submillimétrique à la centaine de mètres pour l'aspect spatial (soit, à nouveau, un rapport de 10^6 entre l'échelle la plus petite et l'échelle la plus grande).

En ce qui concerne le problème posé ici, les phénomènes prépondérants sont différents selon l'échelle de temps ou d'espace considérée, les phases peuvent en outre être soit en équilibre soit en déséquilibre de pression et de vitesse, les matériaux peuvent être denses ou dilués, etc. En ne perdant pas de vue l'objectif final de nos travaux, qui est d'évaluer un terme source local (débits massiques, composition du mélange, etc.), on effectue ici le choix **d'une modélisation zéro dimensionnelle** des événements internes au volume d'étude et des échanges vers l'extérieur (masse ou énergie aux frontières du système).

Le principe d'une telle modélisation consiste à réduire les phénomènes 3D en un système d'équations différentielles en temps, robustes et validées expérimentalement. La réduction est rendue possible par des considérations de symétrie, l'évaluation de temps caractéristiques, et l'intégration ou la réalisation de bilans énergétiques sur l'ensemble du système. Dans notre cas précis, l'emploi de cette méthode se justifie par la focalisation des événements prépondérants à des échelles de temps intermédiaires (par exemple, la prise en compte complète du chauffage d'un liquide avant son évaporation) et à la localisation des phénomènes physiques aux interfaces entre phases en présence. Cette double localisation en espace et en temps consiste à ne considérer que certaines fréquences ou échantillons du problème à traiter. Les équations d'état, les modèles ou relations de fermeture doivent contenir, décrire la physique non prise en compte pour des échelles de temps et d'espace inférieures. De même, le fait de négliger des phénomènes aux temps « longs » ou liés à des échelles supérieures fixent les limites de la modélisation. Ce type de modèles est notamment utilisé pour la compréhension et l'optimisation de moteurs à explosion, et pour être plus précis, du comportement de la chambre de combustion au cours des cycles de rotation du vilebrequin. Dans [50], on peut lire : « *ce document est une base de travail lorsque l'on s'intéresse à la modélisation thermodynamique **zérodimensionnelle** des cycles des moteurs à combustion interne. [...] Il est indispensable d'introduire de la physique dans les sous-modèles pour pouvoir prétendre à des résultats proches des résultats expérimentaux. [...] Ces sous modèles simplifient la description des phénomènes et introduisent inévitablement des constantes d'ajustement, des lois paramétriques de calage. Ils mettent néanmoins au premier plan les événements majeurs.* »

Le paragraphe suivant développe les raisons d'une analogie entre le problème posé et la modélisation des moteurs à explosion. Les figures 38 à 41 et 43, 44 sont issues des références [50, 51].

I.4.2 Analogie avec les moteurs à explosion

Il existe en effet plusieurs raisons de faire ici une analogie entre l'approche zéro dimensionnelle d'une chambre de combustion d'un moteur et le scénario étudié :

1/ Approche cyclique et libération retardée d'énergie :

Le fonctionnement d'un moteur thermique peut être décrit de manière simple par un cycle thermodynamique, le plus souvent représenté dans les plans (P,V) et (T,S). Les différentes phases de ce cycle sont, en première approximation, des transformations isobares, isochores, ou isentropiques (pour le cycle Diesel), selon la position de l'angle du vilebrequin, ou indirectement du volume de la chambre de combustion.

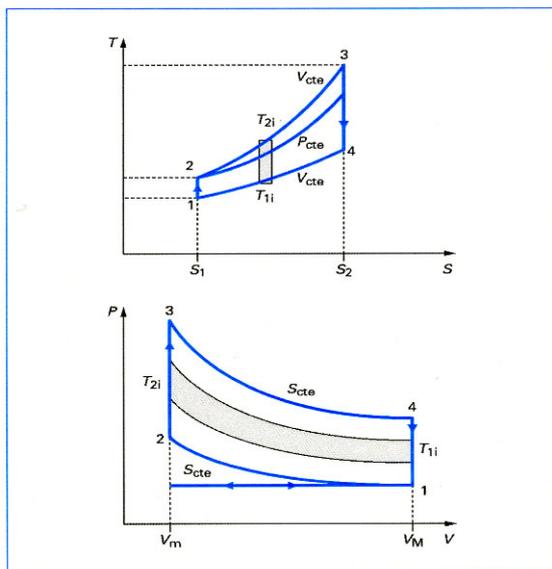


Figure 3 - Diagrammes (TS) et (PV) du cycle de Beau de Rochas

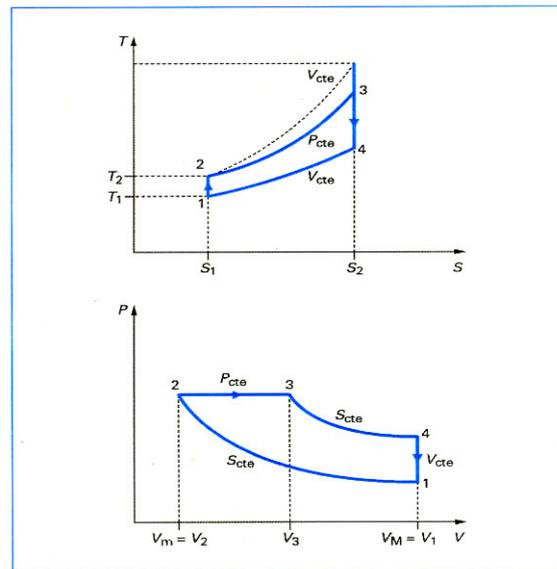
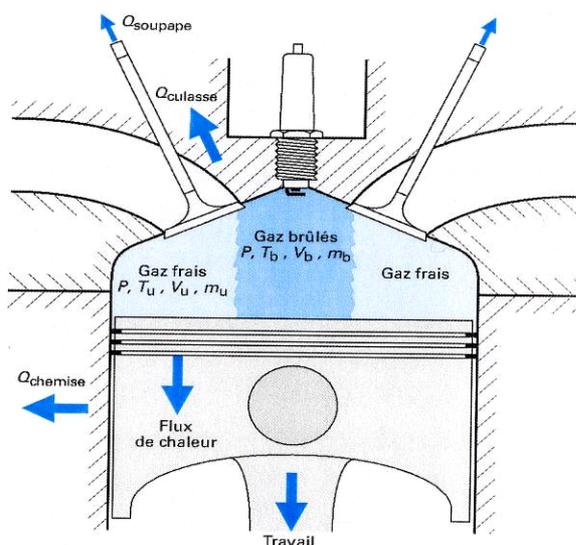


Figure 4 - Diagrammes (TS) et (PV) du cycle Diesel

Figure 38 Cycles moteurs classiquement représentés dans les plans (T,S) et (P,V)

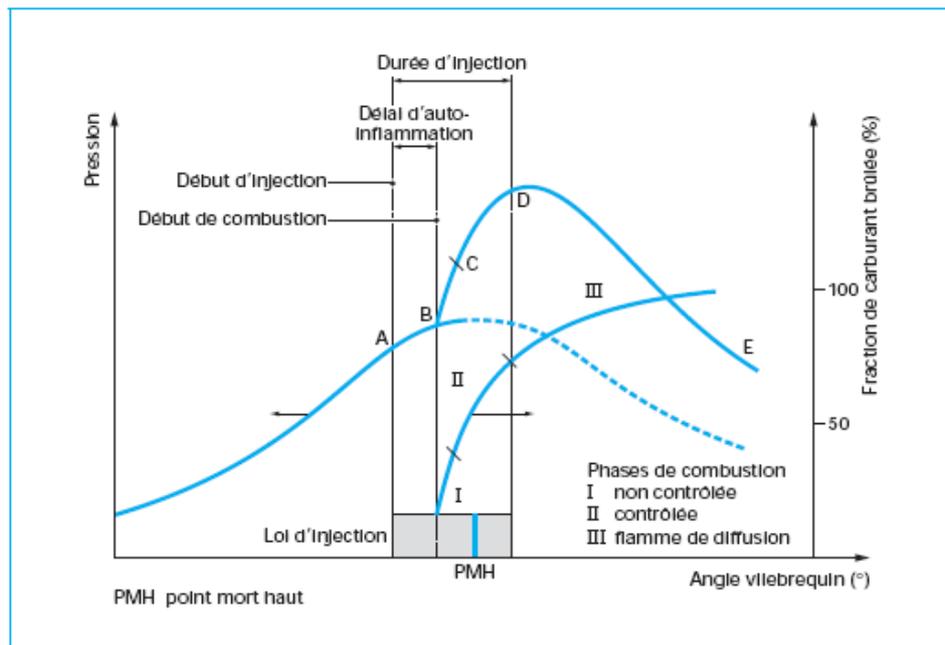


D'une manière générale, c'est la libération d'énergie par combustion, retardée, ou différée, par rapport à l'injection du carburant et/ou la phase de compression qui permet l'entretien du cycle moteur. Plusieurs temps caractéristiques, correctement « organisés » les uns par rapport aux autres, liés à la course du piston, à la dynamique d'injection du carburant, au temps de chauffage des gouttes de carburant, ou à la cinétique de combustion, etc. sont caractéristiques du fonctionnement optimal du moteur.

Figure 39 Schéma de la chambre de combustion – présence de deux zones

Dans cette approche zéro dimensionnelle, plusieurs hypothèses sont formulées afin de modéliser chaque étape du processus. Par exemple,

- Dans la chambre de combustion, quand le piston se trouve au point mort haut (PMH), les réactions sont quasi-isochores : on peut considérer le volume de travail comme constant autour de la position d'inversion de la course du piston, en comparant les temps caractéristiques de ces réactions.
- Les phénomènes d'évaporation ou de combustion de gouttelettes sont considérés en première approximation comme localement isobare, c'est-à-dire au niveau de l'interface entre la phase liquide et la phase gazeuse.



Figures 40 Loi de variation de la pression interne en fonction du temps (angle de vilebrequin) - double phase de Vibe et détente

Au final, la pression interne à la chambre P_{int} peut être modélisée par des lois analytiques élémentaires s'additionnant ou activées selon leurs temps caractéristiques. Ces lois temporelles ont des formes en exponentielles croissantes ou décroissantes, parfois d'hyperboles. Les lois phénoménologiques des moteurs prennent le nom de fonction de Vibe (ou Wiebe [51,52]), qui régissent par ailleurs nombre de lois de la nature terrestre (figure 40). Pour donner un exemple, le dégagement de chaleur Q_c , directement lié au taux de production de gaz brûlés et donc de la pression interne, prend la forme ci-dessous (figure 41) :

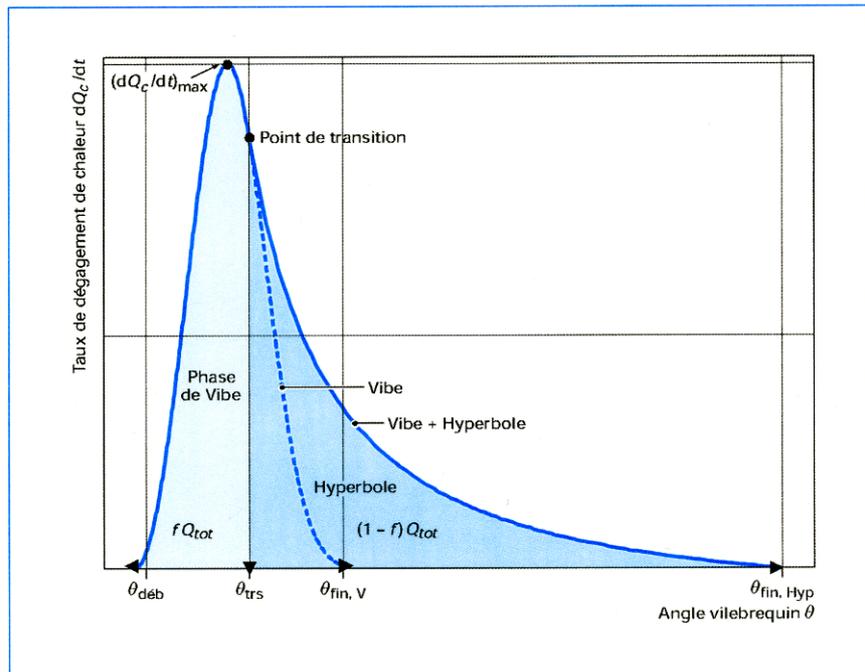


Figure 41 Modélisation d'un moteur - Taux de dégagement de chaleur en fonction du temps

2/ Mélange diphasique : Modélisation du jet de liquide et évaporation / combustion de gouttes - conditions critiques.

Les modèles de comportement des carburants liquides injectés dans l'atmosphère surchauffée doivent décrire le comportement dynamique de la phase liquide : sa description spatio-temporelle est réduite à un taux d'apparition (et donc de disparition) de gouttelettes par exemple, alors que la régression par évaporation de la surface d'une goutte est modélisée par une loi en d^2 . Ceci nécessite de connaître les conditions critiques du carburant et/ou d'avoir déterminé des données telles que un temps d'initiation en combustion. La figure 42 montre par exemple la dépendance de cette donnée, en ms, en fonction de la température ambiante, sous différentes pressions de travail (entre 3 et 40 bars).

L'injection du carburant sous forme de jet est un problème scientifique et technique à part entière. Une manière de modéliser finement ce phénomène d'injection consiste à discrétiser le jet, au cours du temps, le long de sa longueur de pénétration, en paquets ou zones plus ou moins diluées. Chaque « paquet » possédant une densité apparente caractéristique de gouttelettes aura un comportement en évaporation/combustion différent.

Dans le même ordre d'idée, il est possible de considérer différentes zones « chaudes » ou « froides » à l'intérieur du volume d'étude en fonction du degré d'avancement des transformations thermodynamiques ou réactions. La phase liquide dispersée peut se trouver dans une ou plusieurs zones à une température T donnée.

Dans les deux cas, la discrétisation spatiale du problème est sous-jacente à la modélisation et est traduite implicitement dans le système d'équations.

Un raffinement de la modélisation consiste à prendre en considération la probabilité d'interactions mécaniques des gouttes entre elles, ou avec leur environnement (parois de la chambre de combustion).

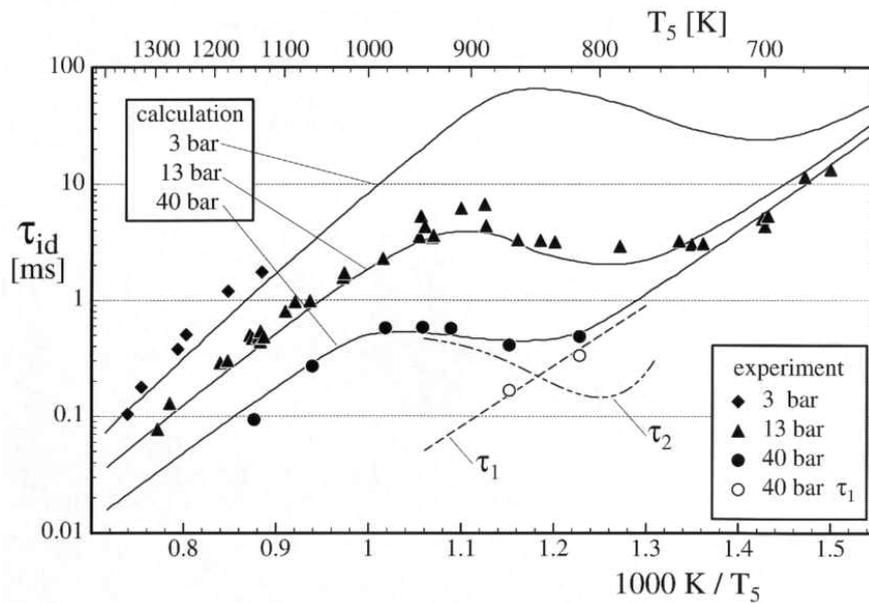


Figure 42 Délai d'induction d'un carburant en fonction de T et P

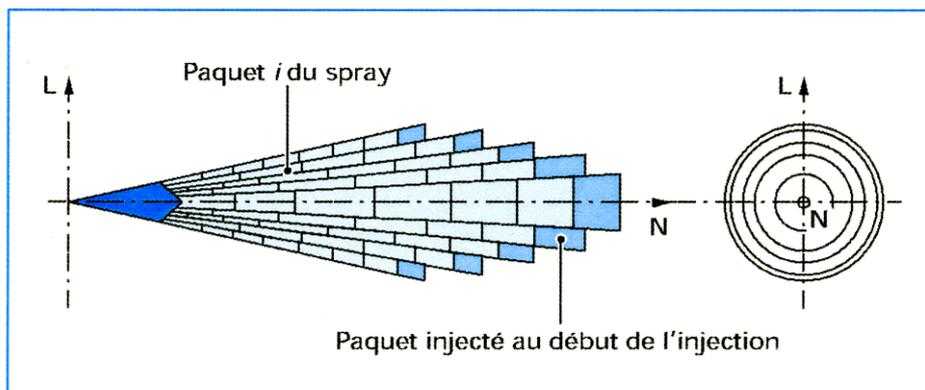
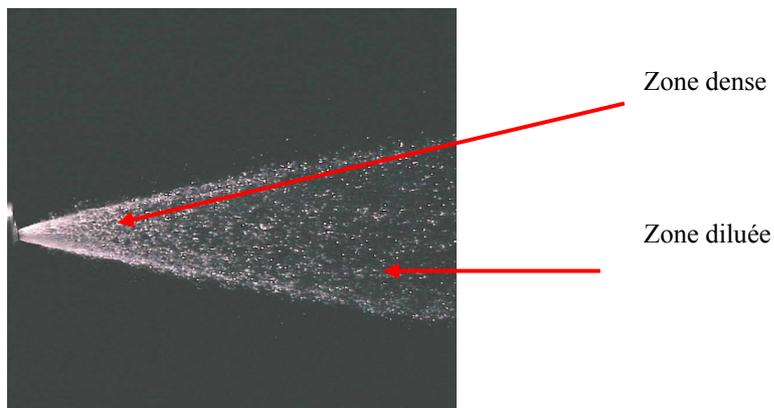


Figure 43 Discretisation du jet par paquet

3/ Définition du système et modélisation des conditions aux limites.

Derniers points également décrits dans ce type de modélisation, les conditions limites du système ont leur importance.

Dans l'étude du fonctionnement d'un moteur, les conditions aux limites sont principalement les pertes thermiques par conduction aux niveaux des parois. Comme nous l'avons indiqué, le système étudié présente un volume non constant.

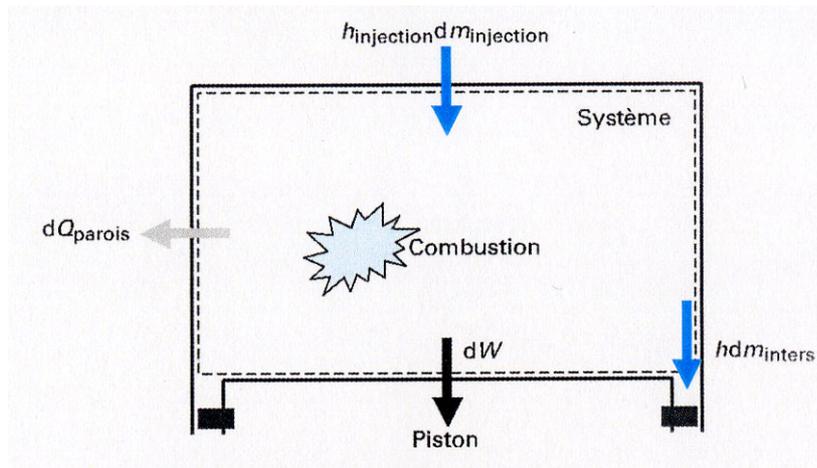


Figure 44 Schéma d'ensemble du système « chambre de combustion » et des flux entrées / sorties

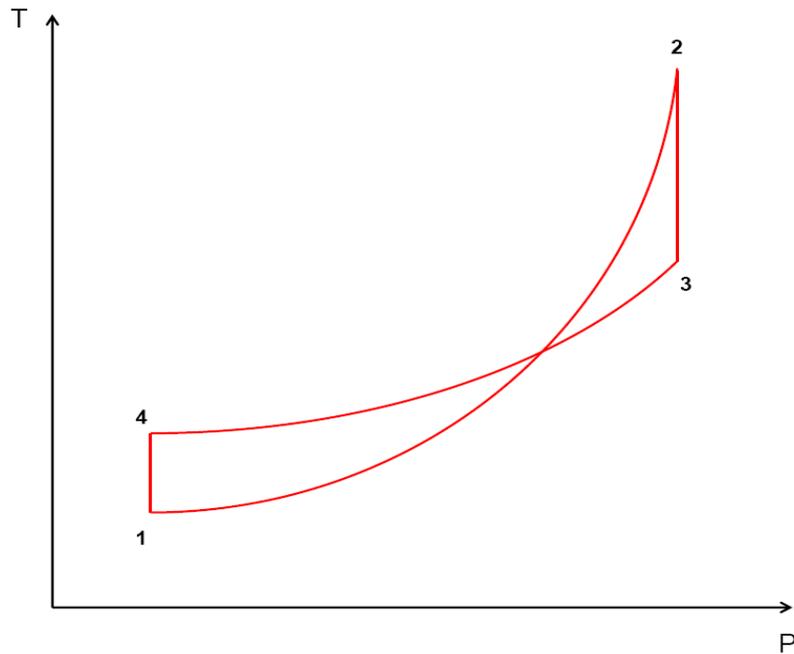
Les bilans d'énergies et de masse pour un moteur prennent en considération les phases d'injection et d'échappement, pendant lesquelles les flux d'entrées et de sortie massique sont supposés connus.

Ces trois items montrent ou sous-entendent bien l'analogie qui peut être faite entre le problème général abordé dans ce mémoire et les systèmes thermodynamiques définis pour étudier les moteurs à explosion, à quelques différences notoires près. En effet, dans le cas qu'il nous est demandé de modéliser,

- Le milieu d'étude est de volume constant, partiellement ouvert vers l'extérieur. Si on observe le système, les transformations internes sont donc globalement isochores, et des échanges de masses sont possibles entre l'intérieur et l'extérieur quelque soit t ,
- La montée en pression et en température du volume V d'étude, indépendamment de la présence de la phase liquide, est due à l'expansion des produits de détonation de l'explosif et la combustion de ceux-ci avec l'air environnant. Dans un moteur, la variation du volume de la chambre selon l'angle du vilebrequin entraîne une modification de P et T .

Les pertes d'énergie au niveau des parois seront négligées sur le temps de montée en pression du milieu, compte tenu des propriétés de ces dernières, et d'autre part de l'unicité du « cycle » étudié (il ne se produit qu'une fois). Les pertes par conduction à long terme et les phénomènes de condensation du liquide sur les parois seront toutefois prises en compte dans le formalisme de notre modélisation.

Le « cycle » étudié dans ce mémoire peut être vu, dans le plan (T, P) de la manière évidemment schématique suivante :



1 → 2 : Montée en pression du milieu
 (explosion de la charge et combustion secondaire)
 2 → 3 : Dispersion et évaporation du liquide
 3 → 4 → 1 : Débit à la brèche et retour à (P, T) ambiante

Figure 45 Représentation schématique des transformations étudiées

Cette représentation est valide si l'on considère d'une part, un comportement inerte de la phase liquide (i.e. seule l'évaporation est prise en compte), et que, d'autre part, l'essentiel des réactions liées à la détonation de la charge explosive ait pu se dérouler avant que la perte de masse via la surface de fuite ne soit prépondérante.

Selon la configuration, la phase liquide injectée dans le milieu ambiant peut être vue de manière identique à celle évoquée plus haut : un jet liquide, plus ou moins dense en périphérie ou au cœur, interagit avec la phase gazeuse, et se fragmente sous l'effet des gradients de vitesse et des variations locales du champ de pression. Il peut être décrit par sa longueur de pénétration dans l'enceinte, et une densité de gouttelettes apparentes. Tout comme pour la modélisation des moteurs à des fins d'optimisation de fonctionnement, l'introduction de physique fine se fera au niveau des sous-modèles. La figure 46 décrit de manière exhaustive les différents niveaux de description du fonctionnement d'un moteur : pour les phases 1 à 3, les sous modèles nécessaires à la modélisation du moteur apparaissent dans les rectangles blancs. Pour la phase 4 – phase de combustion du carburant, la figure précise les différentes étapes de la combustion et la nécessité de considérer les pertes aux parois. A noter enfin que, d'une manière pratique, en banc d'essais, c'est la mesure de la pression interne à la chambre de combustion qui fait référence, car c'est la grandeur thermodynamique facilement accessible et fiable.

Toutes ces observations ont motivé, et validé, le choix d'une modélisation réduite instationnaire de notre problème, en gardant à l'esprit les limites fondamentales du procédé et la nécessité d'introduire dans les sous modèles la physique des transferts de masse et d'énergie entre les différents constituants du système.

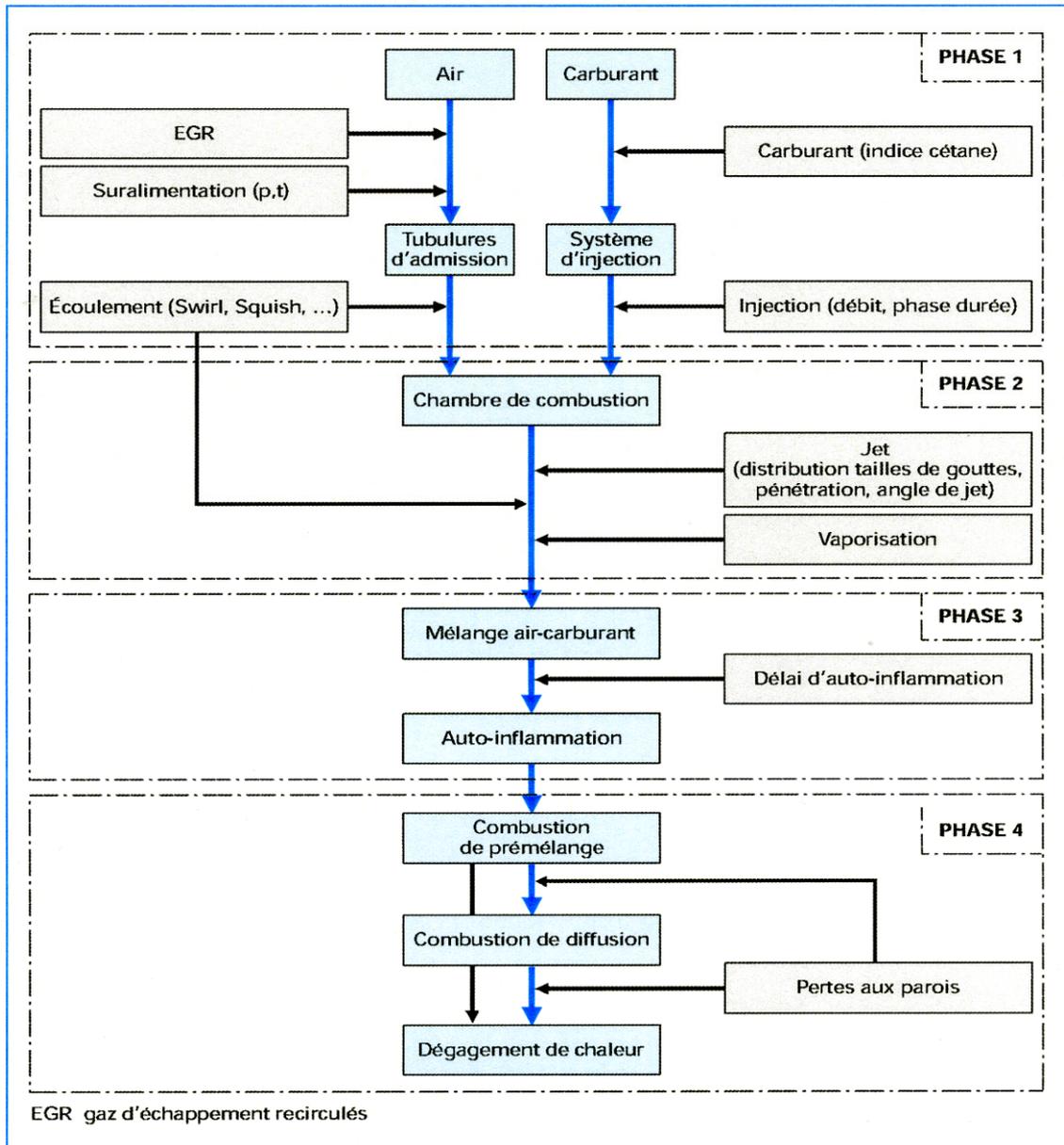


Figure 46 Synoptiques généraux de la modélisation du cycle moteur

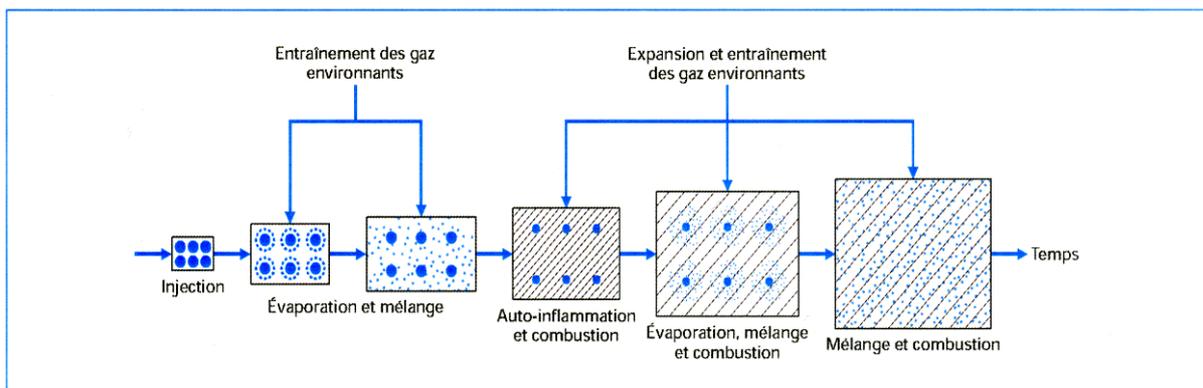


Figure 18 - Évolution temporelle d'un paquet

Figure 47 Evolution par « paquet » des gouttes de carburant

I.5 Quelques hypothèses initiales et précision du domaine d'étude

On précise tout d'abord quelques propriétés physico-chimiques et thermodynamiques de produits chimiques liquides, stockés à pression ambiante, dans des fûts standards, et communément employés dans l'industrie.

Nom du Produit	Masse vol. [kg/m ³] à 20°C	Enthalpie de formation ΔHf [kJ/kg]	Teb [K]	Tcr [K]	Pcr [bar]	Enthalpie de vaporisation ΔHv [kJ/kg]	Pression de vapeur à 20°C [kPa]	Viscosité dynamique à 20°C en Pa.s * 10E-6	Tension superficielle à 20°C [N/m]
Eau	1000	334	373	647	221	2264	0,234	1002	0,073
Acétone	780	98	330	571	60	525	24,7	322	0,0252
Ethanol	789	108	351	517,6	64	850	5,9	1200	0,0221
Méthanol	791	92	337,5	505	78	1100	12,3	587	0,0227
n-heptane	680	141	372	475	16,2	318	5,33	409	0,0201
TMP	1214	-7477	460	764		329	/		0,037
TEP	1060	-6210	486			287,5	/		
TBP	970	-4706	562			252	/		
Benzène	879	128	353	562	47,4	394	9,97	648	0,0288
Glycérine	1260	201	563	850	75	997	/	1490000	0,063
Acide cyanhydrique	687	4,185	299	456,6	53,9	981	83	190	0,0182
Ethylèneglycol	1113	-7420	471	720	82	1058	/	19830	0,0477

interface Liq/air

Tableau 2 Grandeurs physico-chimiques et thermodynamiques utiles pour quelques produits liquides

Les tensions superficielles sont indiquées pour les couples liquides/air. Les valeurs de P et T aux points critiques de chaque fluide sont importantes pour déterminer le régime de vaporisation du produit (partie III) dans les conditions thermodynamiques déterminées en partie II du mémoire.

Ces données sont représentées sur les figures 48 et 49. Contrairement aux carburants automobiles, qui couvrent une zone restreinte, les produits C listés couvrent une large zone des plans représentés.

L'ensemble des propriétés des explosifs pris en considération est répertorié en annexe A. On précise ici une grandeur relative au TNT et au HMX, qui seront nos deux explosifs de référence (partie II) : l'énergie chimique totale, en MJ/kg, a priori libérable par l'explosif, de 14,52 MJ/kg pour le TNT, de 10,04 MJ/kg pour le HMX. Une courte analyse permet de comparer les niveaux d'énergie mis en jeu : enthalpie de vaporisation d'une part, pour les produits liquides, énergie chimique totale a priori disponible pour chaque explosif d'autre part. Les figures 50 et 51 permettent de préciser les valeurs des enthalpies de vaporisation de cette sélection de produits liquides, ainsi que les masses d'explosif a priori nécessaire à une vaporisation totale d'une tonne de liquide, si on formule l'hypothèse réductrice d'une utilisation pleinement efficace de l'énergie de l'explosif pour la vaporisation.

On note que, pour cette liste de produits, l'eau représente un « pire cas » car ce liquide dispose de l'enthalpie de vaporisation la plus élevée, ainsi que de conditions critiques « difficiles » (P élevée, T élevée). D'après les figures ci-après, pour vaporiser 1000 kg d'eau, il « faudrait » 156 kg de TNT contre 225,5 kg de HMX, si, bien sûr, toute l'énergie de l'explosif était consacrée au changement de phase du liquide. On note également que l'enthalpie de vaporisation d'un liquide organophosphoré de type TEP est 8 fois plus faible que celle de l'eau.

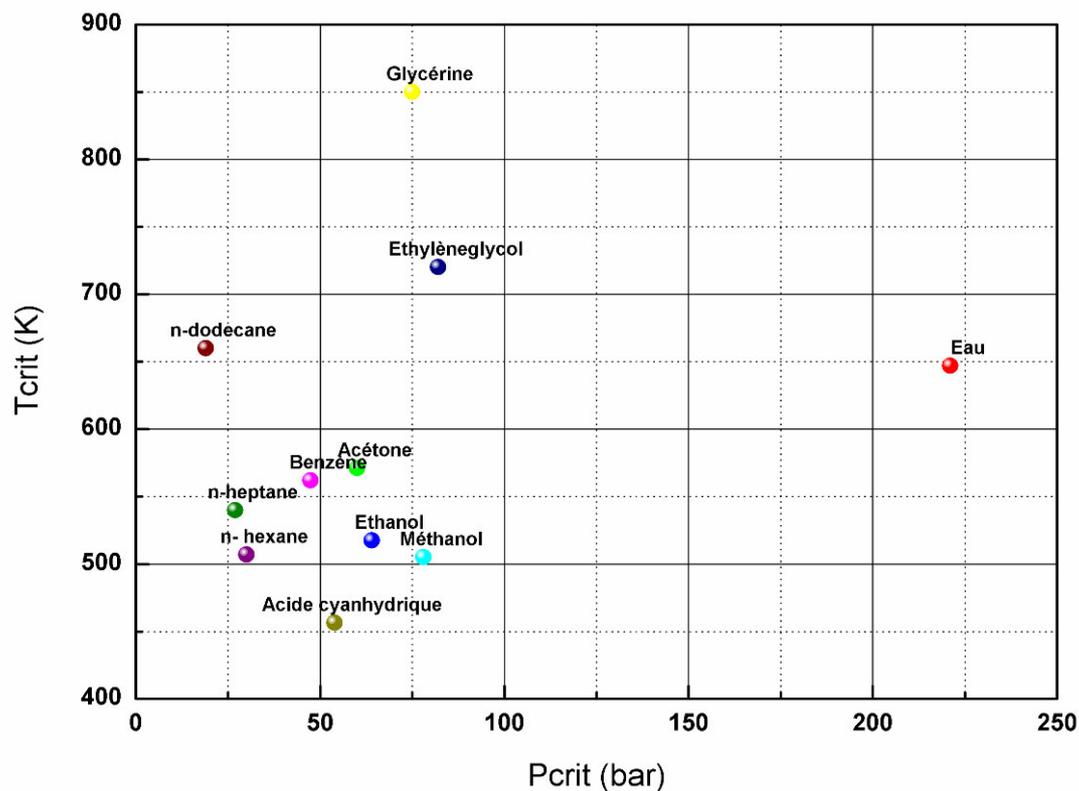


Figure 48 Conditions critiques de quelques produits chimiques liquides retenus

Propriétés physiques de produits C liquides

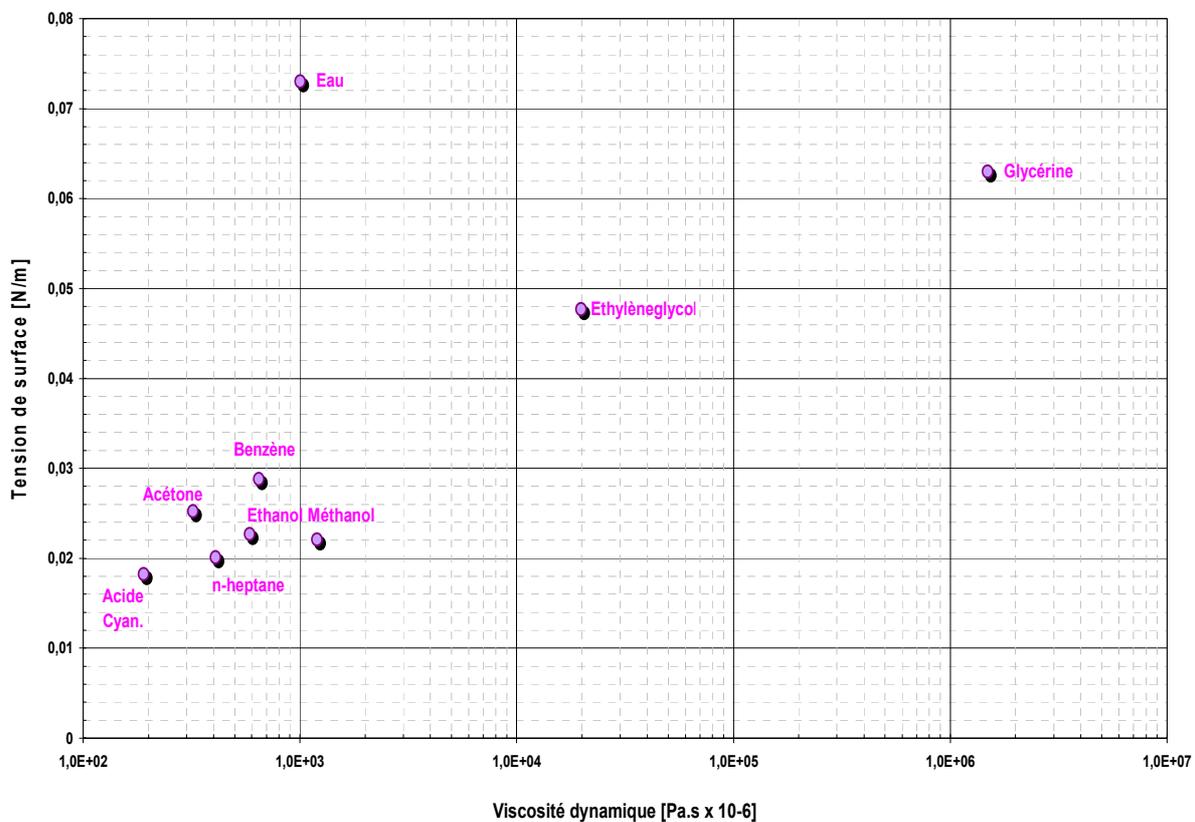


Figure 49 Représentation des couples (ν , σ) pour quelques liquides

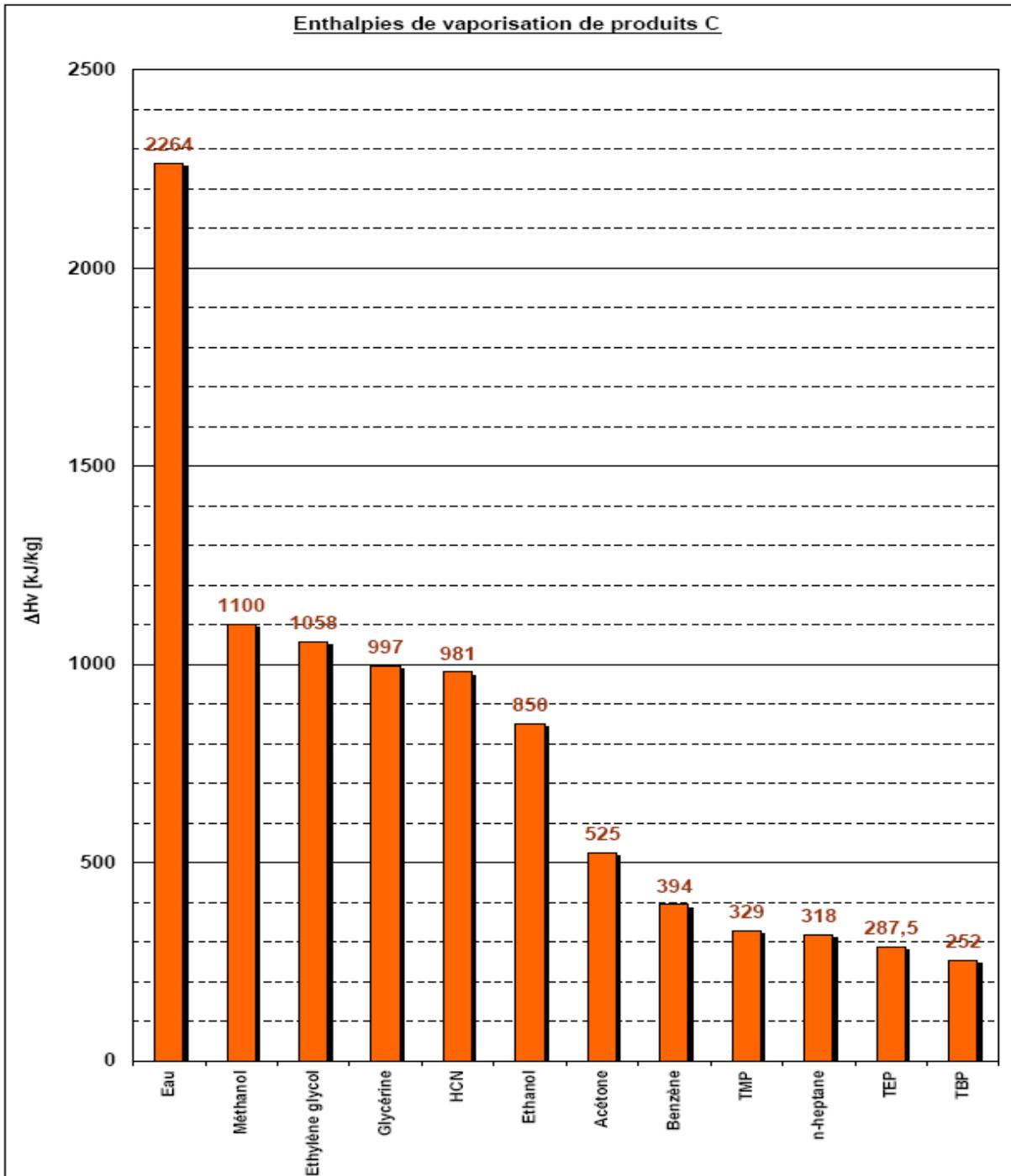


Figure 50 Enthalpies de vaporisation de produits chimiques liquides à (P,T) ambiantes

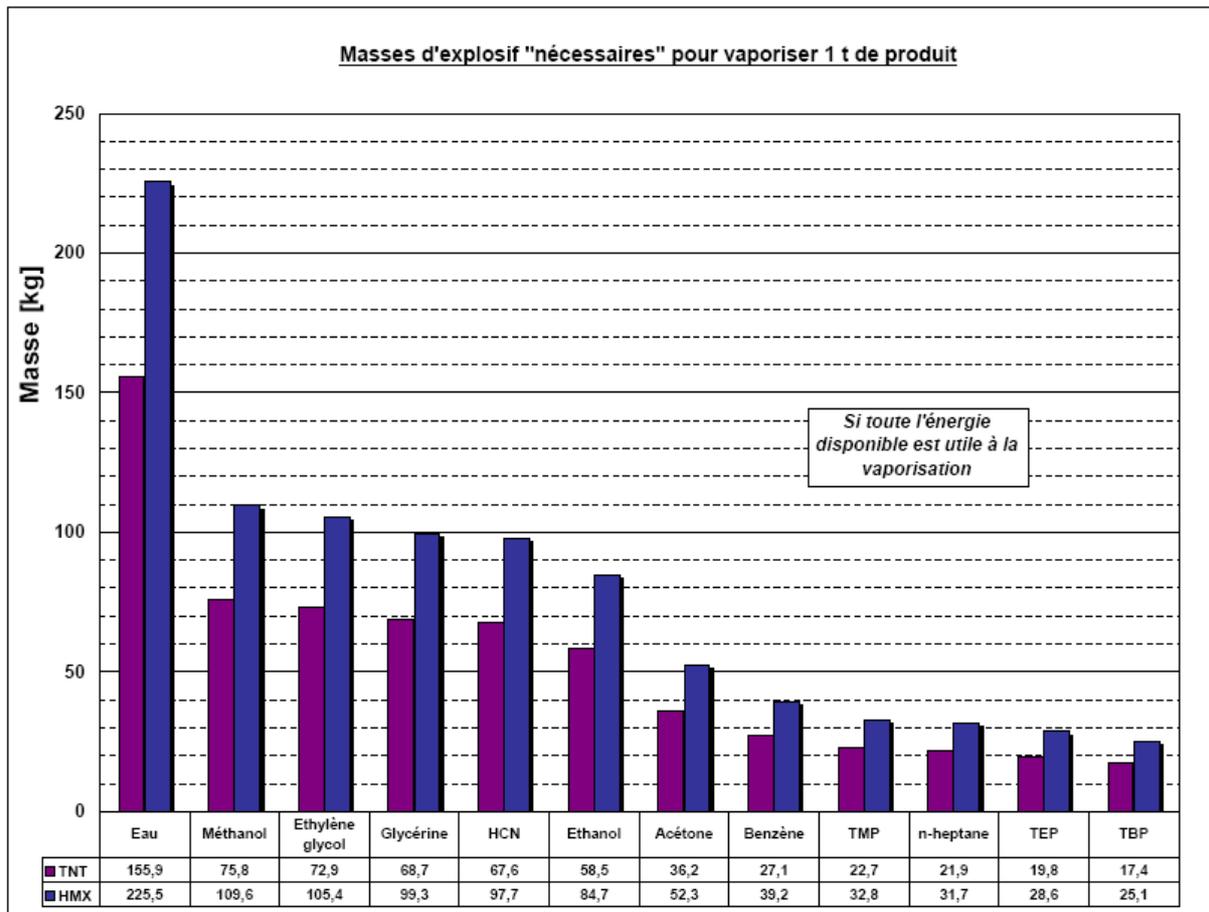


Figure 51 Comparaison des enthalpies de vaporisation avec les énergies a priori disponibles du HMX et du TNT (masses nécessaires à une vaporisation totale)

Les données d'entrées faisant par ailleurs office de référence sont les suivantes :

- volume de l'installation V_{inst} ou V_{tot} **1000 m³**
- dimensions caractéristiques $L \times l \times h$: **20 x 10 x 5 en mètres**
- masse d'explosif dans la charge M_{ex} : **~ 60 kg**
- masse d'agent chimique présent dans l'installation M_{agent} : **~ 1000 kg**
- masse volumique de l'air dans les conditions standards ρ_{air} : **1,18 kg.m⁻³**
- dimensions de la surface de fuite S_e : **~ 0,05 m²**

On a bien un rapport S_e / S_p de l'ordre de 10^{-5} , où S_p est la surface délimitant le domaine d'étude.

Pour être complet, on fixe l'intervalle d'étude en ce qui concerne le taux de chargement en explosif M_{ex} / V_{tot} à la plage **[0,01 ; 0,3] kg/m³**

Comme cela a été expliqué plus haut, l'objectif des travaux est la construction d'un modèle dit *intégré – différentiel*, traduisant les différents couplages. « *Integro* » car le modèle est construit à partir de l'intégration sur un volume de contrôle V des équations régissant les deux phases, liquide et gaz, « *différentiel* » car le cœur du problème réside dans le couplage temporel des phénomènes et l'écriture d'un système d'équations différentielles. Un point clé de la modélisation sera d'exprimer les coefficients d'échange aux niveaux des interfaces entre phases.

Le but des chapitres suivants est donc de modéliser les mécanismes qui sont à l'origine de l'évaporation d'une phase liquide, dans un environnement gazeux, en fonction de sa topologie initiale et en présence simultanée d'écarts de température et de concentration massique. Le changement de phase d'un liquide peut en effet se produire par apport extérieur de chaleur, dans une ambiance quasi constante, via une interface liquide/gaz, le gaz étant plus chaud que le liquide, et par gradient de concentration. L'environnement gazeux est engendré par la détonation d'une charge explosive. Le processus d'évaporation par détente du liquide n'est pas pris en compte dans la présente situation.

Ainsi, la partie II du mémoire est consacrée à l'évaluation expérimentale et à la modélisation des conséquences d'une explosion en milieu clos ou partiellement ouvert : variations, spatiale et temporelle, des champs de pression et de température en fonction des réactifs en présence.

La partie III développe une solution de modélisation des échanges d'énergie et de masse entre une phase liquide dispersée (connue) dans le milieu d'étude et les produits gazeux en présence, ainsi que les rejets potentiels dans l'atmosphère. Les temps caractéristiques des phénomènes, démontrés et validés par les expériences, permettent de construire les hypothèses utiles à la modélisation. On se focalisera dans un premier temps sur le comportement d'une goutte sphérique de liquide soumis à une pression et une température élevée, (afin notamment d'évaluer le temps de vie des éléments liquides), avant de proposer une forme générique des échanges à une interface quelconque. Enfin, on proposera une modélisation simplifiée 0D instationnaire du problème posé dans son ensemble, afin d'estimer les rejets de produits dans l'atmosphère.

Les conclusions relatives à ces travaux, les problèmes que posent une telle réduction, ainsi que les perspectives d'amélioration, des protocoles expérimentaux et des modèles, seront données en partie IV.

Les éléments bibliographiques cités dans cette première partie servent l'analyse globale du sujet de recherche. La liste des références n'est pas exhaustive : chaque partie du mémoire fait l'objet d'une recherche bibliographique spécifique et approfondie, focalisée sur les résultats essentiels et récents nécessaires à nos travaux de modélisation.

Afin également d'alléger l'écriture du mémoire, les données thermodynamiques du problème autres que celles données ici, ainsi que les détails des protocoles expérimentaux, sont placés en annexes (de A à C). On y précise par exemple les types de capteurs employés, et leurs performances, ainsi que les procédures de dépouillement et de post-traitement des enregistrements.

I.6 Bibliographie Partie I

- [1] P. Bonnet, J.C. Couillet, *Omega 19, Détermination des grandeurs caractéristiques du Terme Source nécessaires à l'utilisation d'un modèle de dispersion atmosphérique des rejets accidentels*, Rapport d'étude INERIS, DRA-35, 2006.
- [2] J.C Couillet, *Méthodes pour l'évaluation et prévention des risques accidentels / dispersion atmosphérique : mécanismes et outils de calcul, Omega 12* – Rapport technique INERIS DRA 006, 2002.
- [3] L. Heudier, *Les éclatements de réservoirs, phénoménologie et modélisation des effets, Omega 15*, Rapport technique, INERIS, DRA-35, 2004.
- [4] Fiche de présentation du Ministère de l'Environnement, *Compréhension des phénomènes et modélisation : La Dispersion Atmosphérique*, MEDD/INERIS, 2006.
- [5] *Etude de dangers des Installations Classées pour l'Environnement*, Dossier G4211, Techniques de l'Ingénieur.
- [6] Fiche de presentation *Real Time - Integrated Software for chemical emergency management*, Safer Systems, www.safersystems.com
- [7] H.K. Fauske, M. Epstein, *Source Term considerations in connection with chemical accidents and vapour cloud modelling*, Journal of Loss Prevention in the process industries, vol.1 N°2, 75-83, 1988
- [8] D.M Deaves, C.R Hebden, *Aspect of dispersion following an explosive release*, Atkins Process technical report for UK Atmospheric Dispersion Modelling Liaison Committee, ADMLC/2004/3, 2004.
- [9] F. Jourdain, *Modélisation des transferts atmosphériques de polluants*, Fiche Innovation Techniques de l'Ingénieur, IN 65, 2007.
- [10] A. Hodin, *Modélisation du débit à la brèche et du jet généré par une fuite d'ammoniac en phase liquide : état des connaissances et modélisation des rejets diphasiques*, rapport EDF Note d'étude ELGEG 950062, 1995.
- [11] H. Mohtadi, A. Murshid, *A global chronology of incidents of chemical, biological, radioactive and nuclear attacks : 1950 – 2005*, rapport technique US Department of Homeland Security, 2006.
- [12] *Agent Defeat Weapon, Agent Defeat Warhead*, Article, Global Security.org, www.globalsecurity.org, 2004
- [13] United States General Accounting Office, *Gulf war illnesses – Preliminary assessment of DOD Plume modelling ofr US Troops' exposure to chemical agents*, GA0 03 833T, 2003.
- [14] G. Sakovich et al. *Mathematical simulation of C/B agents neutralization by explosion products contained titanium nano oxide*, Tomsk State University
- [15] C. S. Sheffield, S.M. Babcock, *Sub – Scale in – room weapon tests*, 17th International Symposium on Military Aspects of blast and shock, 2002.

- [16] J.M Thomsen, C.S. Sheffield, *Direct and ricochet fragment damage to water-filled tanks in a long bay*, 16th International Symposium on Military Aspects of blast and shock, 2000.
- [17] W. R. Seebaugh et al., *Summary of collateral effects experiments conducted during fiscal year 1996*, DTRA, Technical Report, 2000.
- [18] G.P Ganong, D.B Myers, W.R. Seebaugh, et al., *Simulation of chemical agent expulsion by penetrating weapons through the use of small scale testing*, 15th International Symposium on Military Aspects of blast and shock, 1998.
- [19] R.G. Ames, et al, *Quantitative distinction between detonation and afterburning energy deposition using pressure-time histories in enclosed explosion*, NSWC, 2006.
- [20] D. Tassia, *Internal blast tests to support the Tomahawk and APET programs*, Indian Head Division, NSWC, Insensitive Munitions Technology Symposium, 1996.
- [21] H. Reichenbach, P.Neuwald, A.L. Kuhl, *Role of precision laboratory experiments in the understanding of large scale blast phenomena*, 17th International Symposium on Military Aspects of blast and shock, Las Vegas, 2002.
- [22] S. Menon, B. Fryxell, *Simulation of strong shock – shear layer interactions in complex domains*, CCL Report 2004 – 015, Georgia Tech, 2004.
- [23] S. Menon, *On Sub grid modelling for Large-Eddy Simulations of Turbulent Combustion*, International Journal of Engine Research, Vol. 1, No. 2, pp. 12-33, 2000.
- [24] A. Milne et al, *Numerical Modelling of two phase reactive flow and aluminised explosives*, Fluid Gravity Engineering Ltd, rapport technique, 2005
- [25] J. Fourrier, A. Milne, *Modelling of bunker trials with a water pool*, Technical Report TR080/08, FGE Ltd, 2008
- [26] S. El Mai, S.B. Cargill, A. Milne, *Analysis of closed volume experiments with octoviton*, Technical Report TR074/06, FGE Ltd, 2006
- [27] L.D. Daily, *Simulating afterburn with LLNL Hydrocodes*, Lawrence Livermore National Laboratory Report UCRL TR 206313
- [28] N. Lecysyn, *Etude et modélisation des conséquences d'un impact balistique sur un réservoir*, Thèse de doctorat, Université de Provence, Novembre 2008
- [29] N. Lecysyn et al., *Liquid discharge – the consequence of catastrophic tank failure due to high energy projectile impact*, SFGP 2007, Saint – Etienne, France, 2007.
- [30] N. Lecysyn et al., *Preliminary study of ballistic impact on an industrial tank : projectile velocity decay*, International Journal of Loss Prevention in the Process Industries, vol.21, Issue 6, pp627-634, Novembre 2008
- [31] N. Lecysyn et al., *Experimental Investigation of a Catastrophic Tank Failure with a High Speed Video Recorder. Image Processing and Hydrodynamic Characterization of the Liquid Jet*, 12th International Symposium Loss prevention and Safety Promotion in the Process Industries, Edinburgh, Scotland, 2007.

- [32] A. Dandrieux et al., *An integrated methodology research to determine consequences of vessel destruction*, ESREL, 2006.
- [33] E. Lapébie, *Projet Rodnik Volna, Etude de critères de décomposition de matériaux organiques sous haute pression et haute température, et validation de nouvelles techniques métrologiques appliqués aux expérimentations dynamiques*, CCTP CEG Contrat CEG/VNIIIEF, 2006
- [34] V.M. Bel'sky, *Study of dispersion and fragmentation of liquid under effect of shock wave*, Federal State Unitary Enterprise, RFNC-VNIIIEF, Sarov, 2008
- [35] L. Munier et al., *Test Facilities and Simulation Models to Assess the Effects of an Accidental Release of Hazardous Materials*, European Survivability Workshop, Toulouse, 2006.
- [36] L. Munier, *Secondary combustion of high explosive detonation products – experimental characterization of thermal effects*, 20th International Symposium on Military Aspects of blast and shock, Oslo, Mars 2008
- [37] L. Munier, *Caractérisation expérimentale du terme source généré lors d'une agression sur une cible durcie contenant des produits chimiques – expérimentations à l'échelle 1/8^e*, Rapport T2006-00021/CEG/DR, 2006
- [38] X. Maldague, L. Munier, *Caractérisation du phénomène de postcombustion d'un explosif classique*, rapport CEG D2005-00089/CEG/NC, 2005
- [39] F. Petitpas, J. Massoni, R. Saurel, E. Lapébie, L. Munier, *Diffuse interface model for high speed cavitating underwater systems*, International Journal of Multiphase Flow, 35, pp 747-759, 2009
- [40] R. Saurel, J. Massoni, E. Daniel, O. Le Métayer et al, *Rapport d'avancement Développement d'algorithmes multiphasiques dans le cadre du PEA AVERTI et intégration dans un code de calcul*, avril 2009.
- [41] O. Le Métayer, J. Massoni, R. Saurel, *Modelling evaporation fronts with reactive Riemann solvers*, Journal of computational physics, 205 (2005), 567-610, 2005.
- [42] J. Massoni, R. Saurel, E. Daniel, *Simulation de l'éjection et de la fragmentation d'un jet multiphasique – Rapport de synthèse- Phase technique 1*, document contractuel, 2004.
- [43] R. Abgrall, R. Saurel, *Discrete equations for physical and numerical compressible multiphase mixtures*, Journal of Computational Physics, 186, 361-396, 2003.
- [44] O. Le Métayer et al., *Modelling Interfaces with Dynamic Phase Transition*, Congrès HDP V, tome 2, pp. 115-124, Saint-Malo, 2003.
- [45] T. Lacaze, G. Baudin, *Analyse de HPAC, caractérisation du terme source pour les agents biologiques et chimiques*, document technique D2002-0128/CEG/DR, 2002.
- [46] Y. Juillet, A. Begos, A. Bossee, C. Albaret, *Analyse chimique d'échantillons collectés lors de l'explosion d'une charge pyrotechnique dans un mini-bunker contenant 5 flacons en plastique remplis de TMP*, note interne NI 2005 – 34 version A, CEB, 2005.
- [47] C. Guérin, *Note de sécurité PM 41200390 - Effets collatéraux d'une défense NBC active*, CEB, 2005.
- [48] R. Laurensou, L. Borny, *Comportement de dalles en béton armé soumises à la détonation en milieu confiné d'une charge explosive calibrée*, rapport d'essais GERBAM 607/04/A/DR/W 120, 2004.

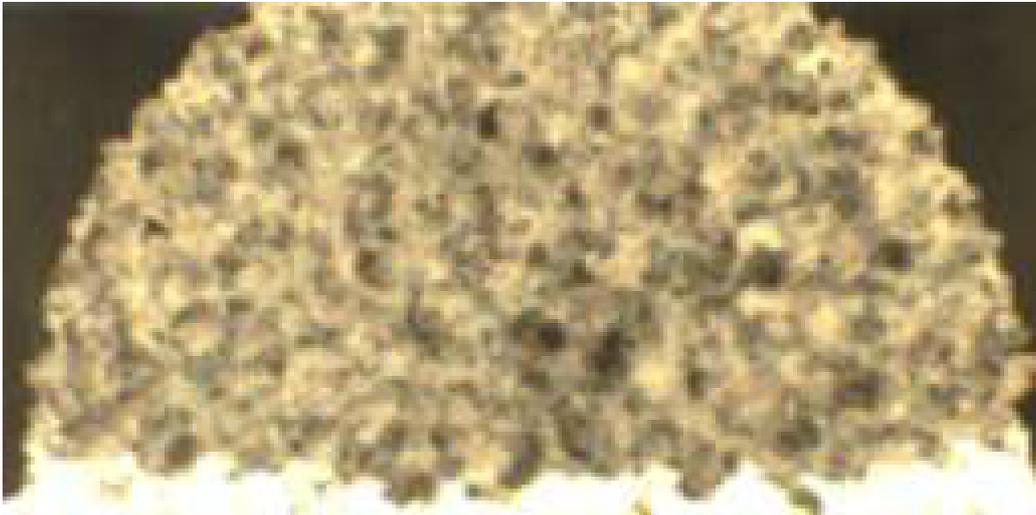
- [49] Y. Jacob, *Évaluation des explosifs en milieu clos*, rapport technique GERBAM 1/89/DR/W, 1989.
- [50] P. Higelin, T. Jaine, *Modélisation du cycle moteur, Moteur à allumage par compression*, Dossier BM 2516, Techniques de l'Ingénieur, Editions T.I
- [51] P. Guibert, *Modélisation du cycle moteur, Approche zéro dimensionnelle*, Dossier BM 2510, Techniques de l'Ingénieur, Editions T.I
- [52] A.K. Oppenheim, A.L. Kuhl, *Life of fuel in engine cylinder*, SAE Transactions, vol.107, n°3, 1080-1089, 1998

Partie II

Etude et modélisation de la détonation

d'une charge explosive

en milieu clos



Visualisation des produits de détonation d'un explosif secondaire en expansion, détonation en milieu clos

II.1 Etat de l'art et position de l'étude

II.1.1 Phénoménologie

La détonation d'une charge d'explosif condensé secondaire engendre une série de phénomènes physiques hautement dynamiques ayant des temps caractéristiques de l'ordre de la μ s pour les plus courts (propagation de l'onde de détonation dans l'explosif), à quelques centaines de millisecondes pour les plus longs (effets de surpression aérienne, maintenue ou non, et combustion secondaire). Ce premier chapitre retrace cette phénoménologie, en précisant les paramètres à priori dimensionnants.

Effets d'une explosion et combustion secondaire

Les explosifs secondaires courants ont une composition chimique de type $C_xH_yN_zO_p$. De par sa nature chimique, l'explosif peut engendrer sous choc ou sous agression thermique une libération brutale d'énergie. Le régime de fonctionnement nominal, et seul pris en compte ici, d'un explosif condensé secondaire est la détonation. Si une énergie suffisante (par le biais d'une amorce par exemple) est apportée à la charge, alors le matériau énergétique passe de son état solide à un état gazeux, appelé « produits de détonation », avec modification de ses constituants, au travers d'une onde de détonation se propageant dans l'explosif à une vitesse de l'ordre de 8 km/s. En aval de l'onde de détonation, que l'on peut modéliser de manière classique par un modèle de type Chapman-Jouguet, les produits gazeux sont portés à très haute pression et très haute température. Lorsque l'onde de détonation débouche à la surface externe de la charge, une onde de choc est transmise dans le milieu connexe. S'il s'agit de l'atmosphère, l'onde de choc est dite aérienne. En aval de l'onde de choc transmise, les produits de détonation (DP) sous haute pression se détendent dans l'air choqué. La vitesse initiale de l'interface u_{sl} , ou vitesse de surface libre, est inférieure mais proche de la célérité de détonation D dans l'approximation des chocs forts (en configuration sphérique, coefficient polytropique des DP pris égal à 3). Si la composition des DP évolue le long de leur détente, elle reste dominée par l'état atteint derrière l'onde de détonation. Typiquement, pour le TNT de formule brute $C_7H_5N_3O_6$, les DP ont la composition à l'état CJ suivante, calculée à l'aide du code thermochimique CHEETAH 2.0 – espèces majoritaires en bleu :

$P_{cj} = 19,57 \text{ GPa}$ et $T_{cj} = 3711 \text{ K}$

Name	(mol/kg)	(mol gas/mol explosive)
h2o	Gas 1.096e+001	2.490e+000
n2	Gas 6.603e+000	1.500e+000
co2	Gas 6.282e+000	1.427e+000
co	Gas 2.848e+000	6.468e-001
ch2o2	Gas 1.843e-002	4.187e-003
ch4	Gas 6.650e-003	1.510e-003
c2h4	Gas 2.918e-003	6.629e-004
h2	Gas 2.910e-003	6.610e-004
no	Gas 2.246e-003	5.102e-004
ch3oh	Gas 7.566e-004	1.718e-004
h3n	Gas 5.586e-004	1.269e-004
o2	Gas 1.730e-004	3.929e-005
ch2o	Gas 6.034e-005	1.370e-005
ch3	Gas 1.627e-007	3.695e-008

c2h6	Gas	1.162e-008	2.639e-009
no2	Gas	2.779e-012	6.311e-013
*c	solid	2.166e+001	4.919e+000
Total Gas		2.673e+001	6.072e+000
Total Cond.		2.166e+001	4.919e+000

Tableau II.1 Composition à l'état CJ des produits de détonation du TNT

On définit également un état intermédiaire dit d'explosion à volume constant (CV) ou état fictif d'équilibre, au travers duquel les ondes de surpression ont eu le temps d'effectuer plusieurs allers – retours. En pratique, ceci peut correspondre à l'état atteint par les DP lorsque la charge explosive est entourée d'une enveloppe massive, avant rupture de celle-ci, ou lorsque la masse d'explosif est importante. A cet état thermodynamique, les DP du TNT ont la composition suivante, toujours calculée par CHEETAH 2.0 :

P_{cv} = 3,23 GPa et T_{cv} = 2998 K

Name		(mol/kg)	(mol gas/mol explosive)
co	Gas	1.582e+001	3.593e+000
h2o	Gas	6.819e+000	1.549e+000
n2	Gas	6.562e+000	1.490e+000
co2	Gas	1.859e+000	4.222e-001
h2	Gas	1.450e+000	3.294e-001
ch4	Gas	1.124e+000	2.554e-001
c2h4	Gas	1.518e-001	3.448e-002
h3n	Gas	8.404e-002	1.909e-002
ch2o2	Gas	1.976e-002	4.489e-003
ch2o	Gas	1.266e-002	2.876e-003
ch3oh	Gas	8.808e-003	2.001e-003
ch3	Gas	2.450e-003	5.566e-004
c2h6	Gas	1.781e-003	4.045e-004
no	Gas	1.636e-004	3.716e-005
o2	Gas	6.281e-007	1.427e-007
no2	Gas	5.711e-011	1.297e-011
*c	solid	1.167e+001	2.650e+000
Total	Gas	3.391e+001	7.703e+000
Total	Cond.	1.167e+001	2.650e+000

Tableau II.2 Composition à l'état CV des produits de détonation du TNT

On note une présence significative d'un hydrocarbure (du méthane ici). Si la composition globale ne subit pas de modifications profondes depuis l'état considéré en aval de la détonation, l'apparition de telles molécules et le déplacement des équilibres (sur C(s), CO, notamment) confère au mélange un pouvoir calorifique conséquent. Ces produits globalement sous oxygénés peuvent réagir avec l'atmosphère ambiante, principalement l'oxygène présent dans l'air (réactions sur C, CO, H₂, CH₄,...).

Ces réactions sont communément appelées réactions de « combustion secondaire ». Elles peuvent représenter selon la composition initiale de la charge la majeure partie de l'énergie libérée (figure II.1).

Pour le TNT, ces réactions peuvent être mises en équation de la façon suivante :

- La détonation s'écrit, en première approximation, *en négligeant la présence de fuel de type méthane CH₄*:



Cette réaction donne une énergie de détonation théorique de 4,567 MJ/kg.

- La réaction de combustion secondaire avec l'air s'écrit alors :



Cette réaction correspond à une énergie théorique de 9,963 MJ/kg (calculée par un code thermochimique).

Ce qui nous donne une énergie totale de 14,53 MJ/kg. Le rapport de l'énergie totale sur l'énergie de détonation est de 3,18 ici.

A l'opposé, l'octogène, faiblement sous oxygéné, libère au cours de la détonation une énergie supérieure à celle engendrée par la combustion secondaire des gaz.

On fait également apparaître sur la figure II.1 le comportement énergétique du Tritonal, charge composée de 80 % de TNT pour 20 % de particules d'aluminium (en masse). Ce type d'explosif libère de l'énergie lors d'une phase qualifiée d'anaérobie : le comportement des particules métalliques au sein des gaz chauds est piloté par la détente du milieu et l'écoulement multiphasique subséquent. Ce problème à trois « étapes » est évoqué ici mais n'est pas pris en compte dans ce mémoire. On se consacre aux charges explosives sans particules métalliques.

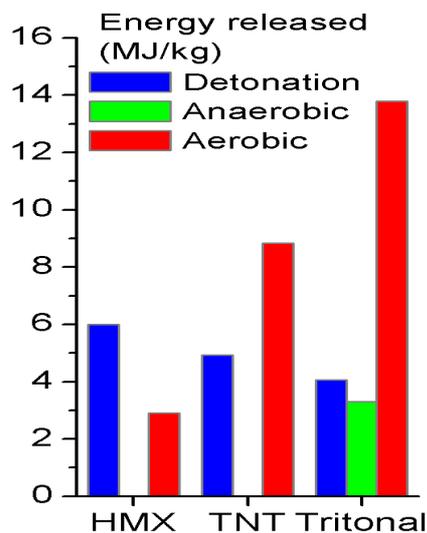
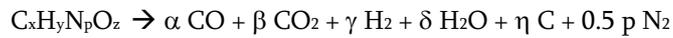


Figure II.1 Représentation graphique des énergies libérées pour trois explosifs secondaires

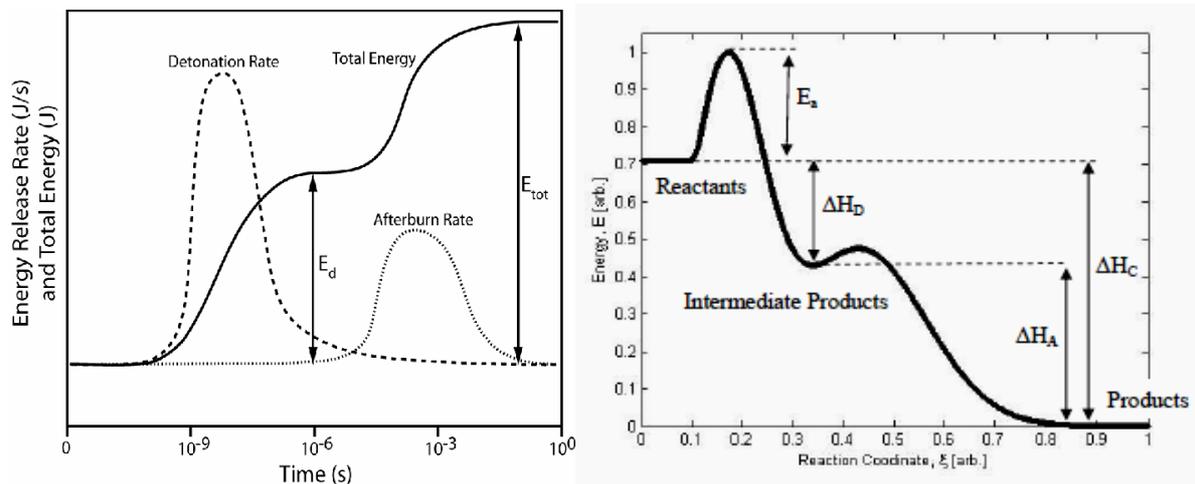
Comme nous venons de le voir, la composition des produits de détonation est a priori calculable à l'aide d'un code thermochimique, mais il réside ici encore plusieurs inconnues : par essence, il est très difficile de geler ou capturer un état intermédiaire au cours de leur détente afin d'effectuer une analyse fine de leur composition.

En théorie, pour les explosifs de type $C_xH_yN_pO_z$ on généralise le développement précédent par l'équation suivante, en négligeant encore la présence d'hydrocarbures :



Cette équation à 5 inconnues peut se résoudre à partir des lois de conservation du nombre d'atomes et de deux équations supplémentaires reliant les concentrations relatives des produits (liées au devenir des atomes de C et de H). Les équations d'équilibre de dissociation du gaz carbonique et l'équation du gaz à l'eau pourraient être celles-ci mais elles ne restent valables qu'à de faibles niveaux de pression. Cette difficulté est en général contournée dans les codes thermochimiques (comme CHEETAH 2.0) en ayant recours à des équations plus évoluées qui calculent l'état d'énergie libre minimale du système. La précision du calcul dépend alors de celle des équations d'état adoptées. Une autre difficulté vient du fait que, à égalité de composition au point CJ, une détente très lente des DP permet au mélange d'évoluer chimiquement jusqu'à de faibles pressions. Une détente rapide, par exemple lorsque l'explosif est de faible dimension et / ou non confiné, produit un figeage intermédiaire de la composition des produits. Ces constatations ont pour effet d'introduire une incertitude quant à la composition exacte des gaz qui vont être impliqués dans les réactions de combustion secondaires. En particulier, des expérimentations à différentes échelles, de laboratoire ou mettant en œuvre des charges importantes, sont nécessaires pour évaluer les effets réels d'une explosion et les énergies libérées, Ces énergies sont a priori mesurables de manière indirecte (variation du niveau de pression, chaleur dégagée, etc.).

Certaines publications abordent de manière détaillée ce processus de libération d'énergie d'une charge explosive en plusieurs étapes, parfois couplées ou superposées. Par exemple, Ames [58] et Steward [117] décrivent le phénomène à l'aide des diagrammes de la figure II.2 :



$$\frac{dE_{tot}}{dt} = \frac{dE_d}{dt} + \frac{dE_{ab}}{dt}$$

Figure II.2 Schéma d'après [58,117] de la libération de l'énergie d'un explosif en fonction du temps

Où E_{tot} est l'énergie totale disponible, E_d l'énergie de détonation, et E_{AB} l'énergie de postcombustion (ou After Burn en anglais).

En effet, si l'on apporte une énergie d'activation E_a suffisante à l'explosif (amorçage), alors la variation temporelle de l'énergie totale est directement fonction des taux de réaction de la détonation et de la combustion aérobie des DP. La formulation ci-dessus est toutefois dangereuse. Il s'agit en effet d'identifier clairement les systèmes auxquels s'appliquent ces deux grandeurs. La détonation se suffit à elle-même alors que la réaction de combustion secondaire nécessite un apport extérieur en oxygène. De plus, une explosion en milieu clos est une transformation à volume constant, ce qui n'est pas le cas d'une explosion en champ libre pour laquelle la pression extérieure reste égale au cours de la transformation à la pression ambiante. On remarque d'ailleurs que selon les auteurs, les dénominations ΔE et ΔH sont indifférenciées.

Ces différentes étapes de libération de l'énergie au cours du temps ont des conséquences directes sur le champ de pression engendré dans le milieu connexe à la charge, lors d'une détonation en champ libre (transmission d'une onde de choc aérienne), et surtout lors d'une détonation en milieu clos, où le système global {explosif + air} évolue à volume constant.

Pour avancer dans la compréhension des effets d'une explosion, on décrit ci-dessous de manière plus détaillée les processus thermodynamiques rencontrés par les DP via ces deux configurations d'explosion, et les chemins conduisant à un état final stable. On précise également les grandeurs a priori caractéristiques du problème (longueur et temps).

Explosion sphérique

Une explosion sphérique constitue une situation « académique » d'intérêt par excellence, que ce soit au niveau théorique (écriture des équations de la mécanique des fluides) ou au niveau pratique (simulation numérique, expérimentations de détonation de charges) de par l'introduction de symétries de révolution.

Dans une telle configuration, l'interface DP/Air est instable : les produits gazeux sous haute température et haute pression sont mis en mouvement dans un milieu « léger ». L'air choqué, voire ionisé au passage de l'onde de choc transmise, reste sous des conditions de masse volumique et de pression moins élevées que les DP. Le caractère instable (génération d'instabilités de mélange) de l'interface I est engendré par le non alignement local des gradients de densité et de pression au niveau de I. De plus, par nature, la surface de la charge explosive n'est pas rigoureusement sphérique (usinage de surface, composition granulaire de l'explosif). De même, l'onde de détonation, dont l'épaisseur de la zone de réaction peut varier localement selon la composition initiale, n'est pas parfaitement sphérique.

Au final, lorsque l'onde de détonation débouche à la surface de la charge, l'interface est initialement perturbée par un large spectre de variations de petites longueurs d'ondes. Ce problème hydrodynamique complexe porte le nom dans la littérature anglo-saxonne de « interface instabilities driven by a detonation wave » et est parfois assimilé à un cas particulier d'instabilités couplées de types Rayleigh – Taylor, puis de Richtmyer-Meshkov, de par la présence d'ondes de choc transmises et réfléchies au niveau de I.

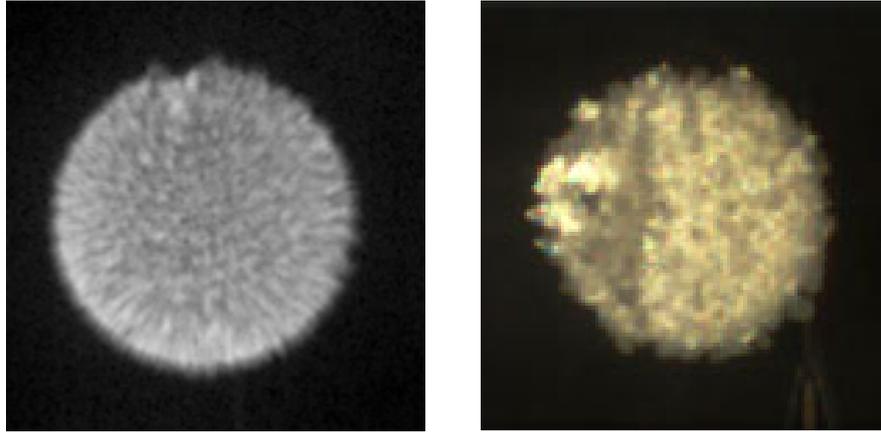


Figure II.3 Visualisation lors d'un tir DCL d'une boule de feu – à gauche, V401, camera Photron Fastcam NB image à $t_0 + 400 \mu\text{s}$ - à droite, TNT, caméra Photron Fastcam couleur, image à $t_0 + 833 \mu\text{s}$

Les premiers travaux disponibles sur ce sujet sont à mettre à l'initiative d'Anisimov dans les références [53] et [54]. L'auteur décrit de manière exhaustive la dynamique du système d'ondes dans une telle configuration. Particulièrement, les ondes réfléchies à l'interface convergent vers le centre de la sphère de gaz en expansion, puis engendrent un deuxième choc divergent. Cette deuxième onde de choc est amenée à traverser les produits de détonation dont la périphérie est en combustion turbulente avec l'oxygène de l'air. La dynamique des ondes est ainsi modifiée (par changement de la célérité du son). Réciproquement, le passage du choc amplifie les réactions chimiques de combustion.

Plus généralement, la prise en compte de la combustion secondaire des produits de détonation est un sujet d'intérêt récent dans la littérature ouverte. Elle appartient également au vaste domaine d'étude que représente la dynamique des instabilités à une interface (inerte ou réactive) gaz/gaz. Leur compréhension ainsi que leur modélisation bénéficient de progrès métrologiques et numériques constants.

La modélisation d'une onde de choc aérienne sphérique a fait l'objet de nombreux ouvrages ou publications, depuis le milieu du XX^e s. On peut citer, de manière non exhaustive, les travaux de références de Dewey [55], Kingery [56] et Brode [57]. Ces derniers ont tracé pour le TNT et des explosifs composites un réseau d'abaques, de manière adimensionnelle, permettant de retrouver graphiquement les niveaux de surpression et d'impulsion engendrés par une masse m d'explosif quelconque en fonction de la distance d'observation. La précision de ces travaux est prudemment nuancée par les auteurs en champ proche de la charge explosive. Ils permettent cependant de mettre en évidence le caractère auto-similaire de la propagation d'un choc sphérique aérien (indépendance par rapport à la masse de la charge dans le plan $(t/R_0, R/R_0)$ de la trajectoire du choc).

Au CEA Gramat, des travaux antérieurs ont permis de développer un outil numérique, appelé SPEEDY G, permettant de simuler la dynamique complète de la détonation d'une charge sphérique, sans prendre en compte les effets de combustion secondaire et le caractère instable de l'interface DP/Air. Avec cet outil, on calcule de manière précise la solution analytique du « tube à choc sphérique » : le gaz moteur est constitué des produits de détonation, le gaz de travail est l'air. La détonation est entièrement simulée : les profils de densité et de pression suivant le rayon de la charge explosive sont déterminés.

En adoptant un couple d'équations d'état de type JWL pour DP, gaz parfait pour l'air (tabulée par niveau d'énergie pour tenir compte de l'ionisation), il est aisé de tracer la trajectoire théorique de l'interface raide DP/Air. La figure II.4 montre en exemple un résultat bien connu pour l'octoviton et le TNT. On y observe notamment les pulsations théoriques de cette interface, à l'origine de la propagation de la première onde de choc aérienne (effet piston de l'interface) et des suivantes. Les courbes de gauche illustrent la dynamique de I pour trois masses croissantes d'octoviton. Le graphique de droite permet de comparer dans un repère réduit par le rayon initial de la charge R_0 le comportement de I pour le TNT et l'octoviton.

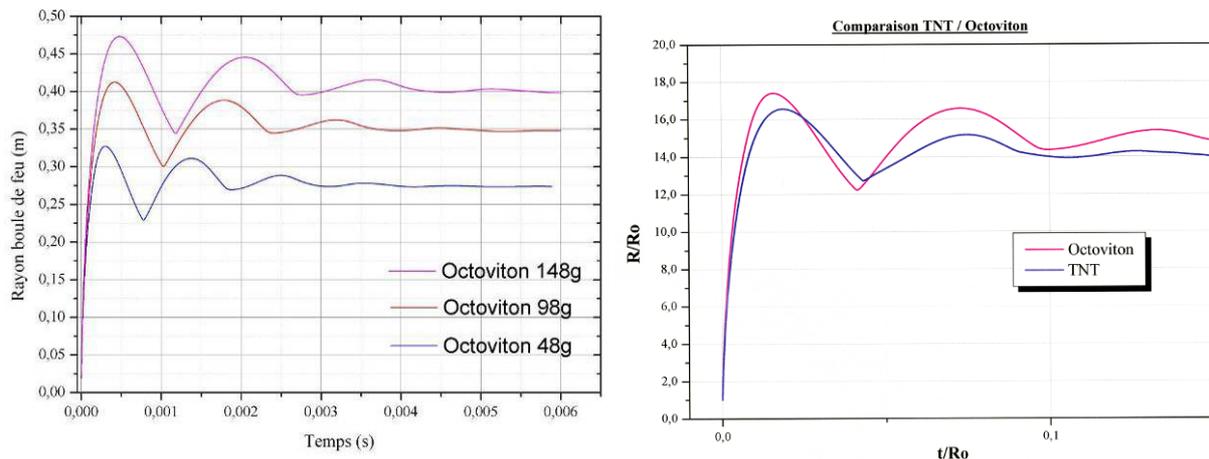


Figure II.4 – Calcul du rayon théorique de l'expansion des produits de détonation à l'aide du code SPEEDY G3 – à gauche : rayons pour trois masses croissantes de V401 – à droite : comparaison TNT, V401 dans un repère réduit.

On obtient bien le résultat théorique connu d'un rayon stable des DP de 15 fois R_0 environ. Les différences entre le régime de pulsation du TNT et celui de l'octoviton s'expliquent par les différences de célérité de détonation (pente à l'origine) et des propriétés des gaz le long de leur adiabatique de détente.

Dans une configuration réelle, comme nous l'avons déjà précisé, cette interface continue n'existe pas. Il existe par contre une zone de diffusion turbulente au sein de laquelle les instabilités se développent radialement, vers l'extérieur et vers l'intérieur de la boule de feu (figures II.5 et II.6). Ce phénomène est mis en évidence expérimentalement par l'utilisation de moyens optiques de type interférométrie [62, 66, 67] ou grâce à l'utilisation de caméras numériques ultrarapides [70].

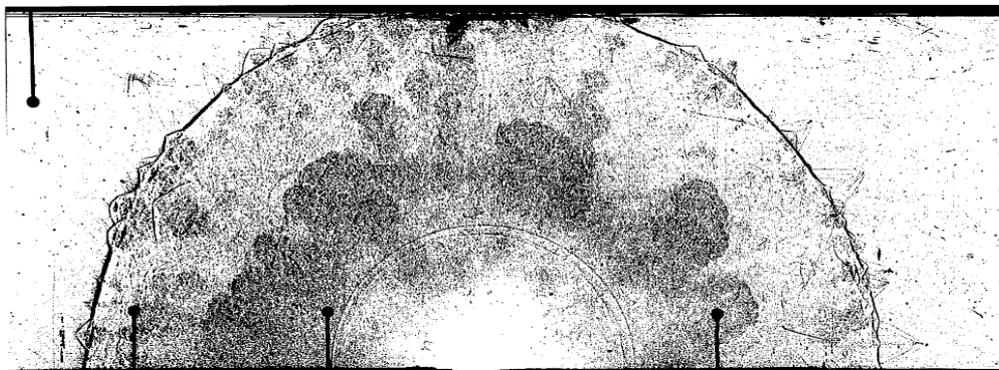


Figure II.5 Visualisation par interférométrie de l'expansion des DP et de la propagation des ondes de choc primaire et secondaire pour une charge cylindrique [67]

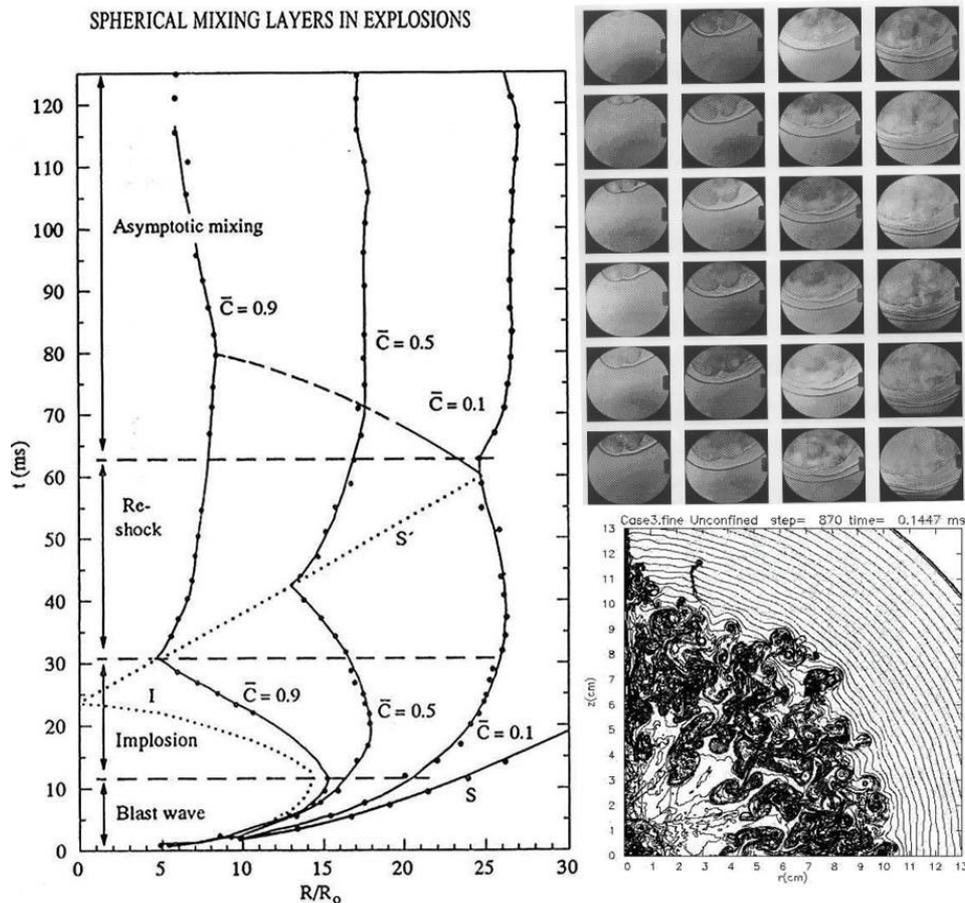


Figure II.6 Simulation numérique par méthode AMR du mélange turbulent DP/Air pour une charge sphérique de TNT- à gauche, courbes d'iso concentrations obtenues, à droite, visualisation des instabilités pour une masse de 1 g [60] (expérimentale et numérique)

L'estimation de la longueur de diffusion turbulente, c.à.d. de l'épaisseur de la zone de mélange, est un problème nécessitant des efforts importants d'un point de vue métrologique. C'est au sein de cette zone que se déroulent lors d'une explosion en champ libre les réactions de combustion secondaire entre les DP et l'oxygène de l'air.

On peut citer ici les travaux expérimentaux de Reichenbach et Neuwald [66,67] : en configuration cylindrique (figure II.5) et grâce à un amorçage linéaire le long de l'axe de l'explosif, les auteurs réussissent à visualiser l'évolution des produits gazeux de l'explosif. Dans le même esprit, d'autres auteurs [62] ont visualisé grâce à des techniques interférométriques l'expansion des DP d'une très petite charge (masse inférieure à 1 g) à l'échelle du laboratoire, ainsi que le détachement de l'onde de choc aérienne (figure II.6).

S'il est difficile de déduire des images obtenues des données quantitatives, ces expériences ont permis de formuler les hypothèses essentielles à la modélisation du phénomène.

Au CEA Gramat, la réalisation d'expérimentations DCL (annexe C) ont permis de mettre en évidence la prédominance de l'hydrodynamique lors de la première phase d'expansion des gaz, phase terminée par la propagation divergente du second choc. Des campagnes expérimentales ont

fait l'objet d'une analyse et de rapports ou publications spécifiques [70, 87, 132, 134] au cours de cette thèse mais ce travail n'est pas détaillé dans le présent mémoire.

Dans le cadre de notre problématique, il est cependant primordial de caractériser le développement de la « boule de feu » en champ libre, afin d'estimer une longueur caractéristique (volume occupée par les gaz en combustion) et un temps de réaction (durée du phénomène lumineux).

Qu'appelle-t-on dès lors les rayons *réel* et *maximal* de la boule de feu ? Il s'agit du rayon de la zone effectivement lumineuse dans le spectre visible, qui correspond au lieu extrême des réactions de combustion. Par analogie, on peut voir cette limite comme un front de flamme. Le rayon maximal est le rayon stable atteint par la sphère avant réactivation des réactions par le second choc, c'est-à-dire le rayon maximal atteint lors du développement auto similaire de la boule de feu. La valeur réduite, indépendante de la masse de la charge, du rayon maximal est caractéristique d'un explosif. Par exemple, pour le TNT, ce rayon maximal est de 25 fois R_0 , soit une valeur 1,67 fois supérieure à la valeur théorique donnée par la solution numérique du tube à choc sphérique.

Plusieurs laboratoires, notamment américains, ont tenté et tentent encore de simuler à l'aide de codes numériques hydrodynamiques la propagation d'une onde de choc aérienne sphérique et la combustion turbulente des produits de détonation avec l'air. Ce défi demande de résoudre de nombreux challenges tant au niveau des outils numériques (maillage, solveur) que du jeu d'équations (et sa fermeture) à prendre en considération pour traiter l'ensemble du processus. Ces efforts de modélisation demandent encore aujourd'hui de lourds moyens et sont coûteux.

Au Etats-Unis, au LLNL, A. Kuhl a réalisé la simulation de l'explosion sphérique d'une charge de TNT en formulant les hypothèses de nombres de Reynolds, de Péclet et de Damköhler infinis [60] : la diffusion moléculaire, les transports de chaleur par conduction et la viscosité, au sein de chaque phase gazeuse, sont négligés : ce type d'écoulement est appelé écoulement limite aux grands nombres de Reynolds et de Péclet. L'auteur utilise des lois d'état de type gaz parfait pour les produits issus de la détonation, l'air et les produits de combustion. Les références [102,103 et 108,110] relatent les premières simulations numériques de la combustion turbulente réalisées avec un schéma numérique s'apparentant à une méthode MILES sur un maillage adaptatif pour capturer les instabilités de combustion (charge de 875 g de TNT). Le schéma réactionnel se résume à une seule réaction de combustion, les produits de détonation avec 5.3 moles d'oxygène pour former des produits de combustion, et la réaction est considérée comme infiniment rapide (Nombre de Damköhler infini).

Ces travaux se poursuivent jusqu'en 2003 avec une série d'expérimentations destinées à valider la modélisation proposée et plusieurs raffinements successifs de la description thermodynamique. La référence [113] résume les derniers aboutissements du modèle. Le modèle comporte alors quatre fluides : le fuel (produits de détonation), l'oxydant (air), les réactifs (mélange stœchiométrique du fuel et de l'air) et leurs produits de combustion. La thermodynamique est décrite dans le plan de Le Chatelier, énergie interne en fonction du produit de la pression par le volume spécifique, noté w sur la figure II.7, où les courbes sont linéarisées. A la constante des gaz parfaits près, w correspond à la température. Le modèle de combustion est à trois étapes : formation des produits, transformation thermodynamique, retour à l'équilibre thermique. Il est mis en œuvre dans un code d'hydrodynamique rapide 3D doté d'une méthode AMR, « Adaptive Mesh Refinement » pour capturer la structure des zones de mélange turbulentes.

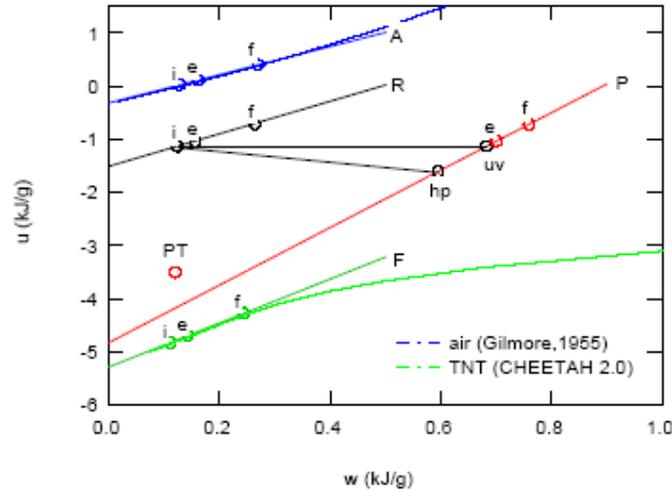


Figure II.7 Diagramme de Le Chatelier pour les produits de détonation du TNT (F : fuel, A : air, R : réactants stœchiométriques P : produits de combustion à l'équilibre) [113]

En suivant une méthode quasi-similaire, Klomfass [68], en Allemagne, réussit à restituer pour le TNT l'influence de la combustion secondaire sur la dynamique des ondes transmises (figure II.8).

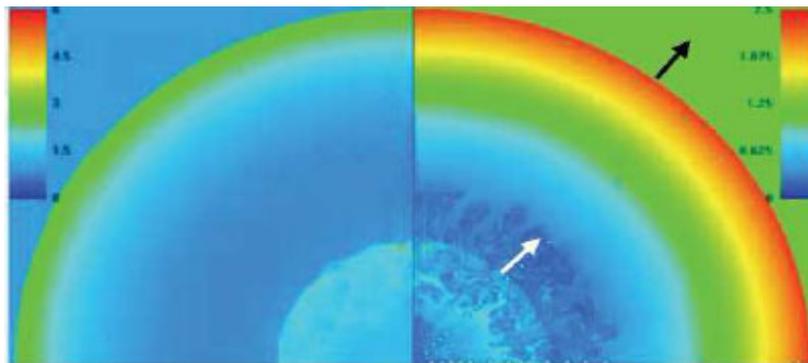


Figure II.8 Simulation numérique de la détonation d'une sphère d'explosif et influence de la combustion secondaire sur la dynamique des ondes – à gauche, champ de pression, à droite, champ de densité

Ces différents travaux numériques permettent d'estimer la longueur de diffusion turbulente, c.à.d. l'épaisseur δ de produits de détonation engagée dans le processus de mélange au court du temps.

Kuhl [60,107] propose de définir deux frontières, dites intérieure et extérieure en relevant les lignes d'iso-concentration moyenne de l'un des réactifs (figure II.6) : l'extérieur de la zone de mélange est défini par l'ensemble des lieux où la concentration en produits imbrûlés est égale à 10 % et, a contrario, la frontière intérieure est l'ensemble de lieux où la fraction d'imbrûlés est égale à 90 %. Lorsque la boule de feu atteint un rayon stable, cette épaisseur δ est de l'ordre de $22 R_0$. Cette dimension caractéristique en configuration sphérique reste difficile à vérifier expérimentalement de part les propriétés optiques des gaz en combustion.

Au final, à la fin du processus de diffusion turbulente, il n'y pas, selon la composition initiale de l'explosif, combustion totale. Une fraction des produits de détonation n'est pas concernée par la combustion secondaire à la fin du développement auto-similaire de la boule de feu mais ces gaz peuvent encore brûler avec l'air via d'autres phénomènes de transport convectifs et diffusifs. Expérimentalement, cela se constate facilement lors de l'explosion d'une charge de TNT par la

présence de « fumées » noires et de suies résiduelles sur les instruments de mesures placés à proximité. Des particules carbonées sont présentes.

Bien que fortement dynamique, le procédé de mélange de l'oxygène de l'air avec les DP peut être amélioré ou amplifié: c'est le cas d'une explosion en milieu clos.

Explosion en milieu clos

Dans une telle configuration, la transformation du système est globalement isochore, les produits gazeux étant confinés sur une durée suffisamment importante (pas de rupture de parois ou de surfaces de fuite significative). Outre le développement turbulent de la boule de feu évoqué ci-dessus, les réflexions multiples des ondes de choc sur les parois de la salle permettent une réactivation locale des réactions de combustion et une amplification du mélange des espèces présentes.

Il y a par exemple de multiples interactions des ondes de choc avec les instabilités de mélange et tourbillons en formation en bordure de la boule de feu. D'un seul point de vue simulation numérique, une simulation fidèle des réactions chimiques au sein de cette interaction choc / instabilité est complexe et coûteuse.

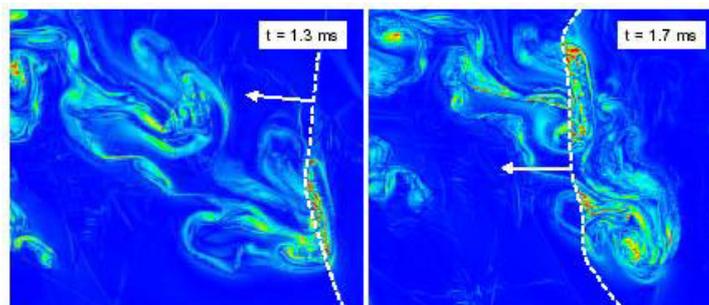


Figure II.9 Interaction d'une onde de choc et d'une instabilité hydrodynamique –amplification de la vorticité et des réactions de combustion au passage de l'onde [68,69].

Au final, les multiples réactivations de la combustion secondaire peuvent conduire à une combustion totale des produits en présence, si bien sûr l'oxygène de l'air est en excès. C'est cette libération amplifiée de l'énergie initialement disponible qui va conduire à d'importants effets thermomécaniques à l'intérieur du volume d'étude. Après plusieurs allers-retours des ondes, la pression atteint une valeur homogène et constante appelée pression quasi-statique et notée généralement P_{qst} ou QSP dans la littérature anglo-saxonne (figure II.10), déjà évoquée et définie dans la première partie du mémoire (voir également annexe B). $P_{qst}(t)$, en tout point du volume, peut également être vu comme la composante continue de la surpression engendrée par les processus de transformations thermodynamiques (détentes et combustion secondaire). La surpression réelle totale et P_{qst} ont des impulsions égales.

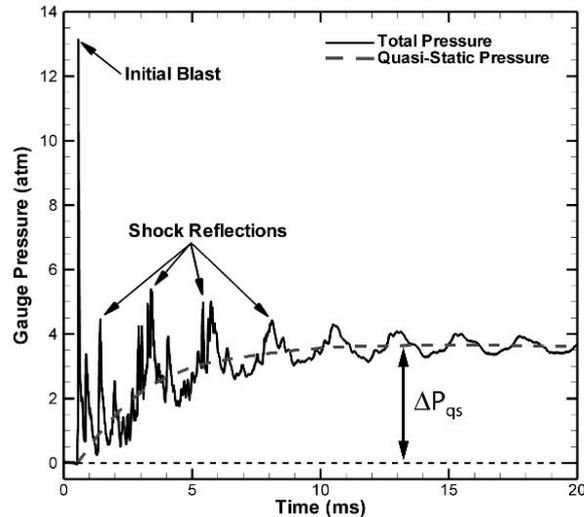


Figure II.10 Signal caractéristique de la montée en pression d'un milieu clos suite à l'explosion d'une charge – le signal converge vers P_{qs} [65]

La fraction massique des produits de détonation subissant la postcombustion en milieu fermé dépend étroitement du rapport masse d'explosif / volume de la salle : si la quantité d'oxygène est suffisante, l'oxydation complète se produit bien plus efficacement (et rapidement) qu'en milieu ouvert. La figure II.11 présente les résultats de la simulation numérique de l'explosion d'une charge de C4 dans une enceinte cubique. On peut y observer la réflexion initiale des ondes sur les parois ainsi que l'interaction de celles-ci avec les instabilités hydrodynamiques [88]. Ce calcul est réalisé grâce au code britannique EDEN, code eulérien multi matériaux. Les réactions de combustions sont pilotées par un schéma simplifié à 3 équations.

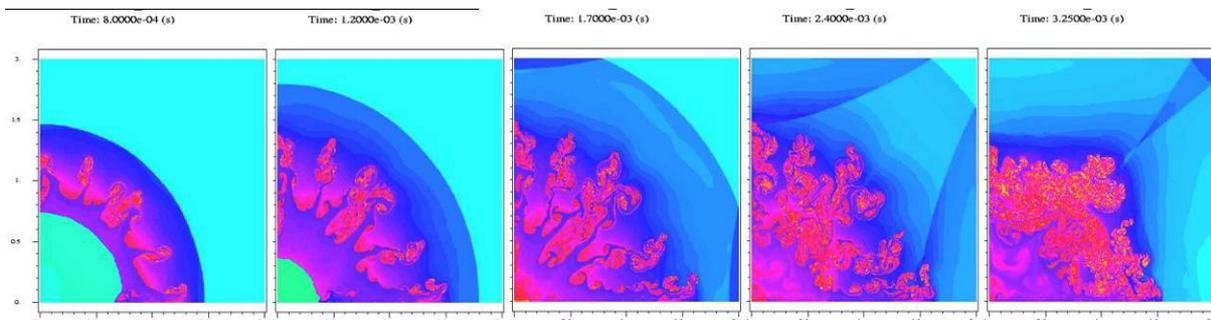


Figure II.11 Simulation à l'aide du code multiphasique EDEN [88] d'une explosion en volume clos – réflexions des ondes de choc sur les parois et interaction avec les gaz en combustion – champ de densité

L'article [113] donne les courbes obtenues par des capteurs numériques placés en différents endroits d'un volume clos simulé, pour une explosion d'une charge sphérique de 1 kg de TNT placé au centre de la pièce de 16 m³. L'auteur compare les courbes obtenues en prenant en compte la combustion secondaire (explosion sous air), et sans cette phase réactive (explosion sous azote) : la figure II.12 montre les signaux de surpression obtenus. Le niveau de pression sous air est bien entendu plus élevé. Plus précisément, sur la figure II.12, l'auteur fait apparaître après traitement les courbes de pression quasi-statiques. Cette figure a le mérite de montrer clairement la montée continue de la pression quel que soit le point de l'enceinte. On peut aisément définir grâce à ce type de courbe un temps de montée, par exemple à 95 % de la valeur du plateau final. Sur cet

exemple, le temps de montée est de l'ordre de 20 ms pour un taux de chargement m/V de 0.0625 kg/m^3 .

Cette communauté américaine de recherche s'appuie également sur les travaux menés en Pologne par P. Wolanski et son équipe [62] qui réalisent des expérimentations instrumentées sur les phénomènes de combustion en chambre de 100 litres (environ 1g de TNT) en ambiances diverses (azote, air, oxygène), dans l'objectif de construire le diagramme de Le Chatelier correspondant. Cette publication et les références expérimentales qu'elle contient sont très complémentaires des travaux théoriques de A.L. Kuhl.

Toujours en Pologne, W.A. Trzcinski et J. Paszula [63] reprennent ces modèles thermodynamiques et les appliquent, sous une forme légèrement différente, à des explosions de charges de TNT en milieu confiné. Leur modèle est utilisé en méthode inverse pour accéder à l'évolution temporelle du taux de postcombustion aérobie des produits de détonation à partir d'enregistrements de pression mesurés dans une chambre de 150 dm^3 , sous atmosphère contrôlée d'air ou d'azote.

Dans le même esprit, parmi les autres articles du LLNL, il faut remarquer un court papier qui présente une même résolution du problème inverse [111]. Celle-ci consiste, en fonction de l'augmentation de pression en milieu confiné, à identifier la quantité de fuel impliquée dans la combustion, ce qui permet de calculer l'évolution temporelle des différentes grandeurs, dont la pression quasi-statique $P_{\text{qst}}(t)$. Il nous faut noter que cette approche est similaire sur beaucoup de points à celles utilisées par les motoristes pour élaborer des modèles 0D de combustion pour les moteurs à combustion interne. Ces deux articles ont directement inspiré nos travaux de réduction des effets d'une explosion en milieu clos, confortés par les difficultés métrologiques que nous évoquerons par la suite.

Dans la publication [105], Ripley réalise des expérimentations de détonation en milieu clos de charges de TNT et de charges mixtes TNT-Al, sous air (charge cylindrique – chambre cylindrique). L'auteur relève à partir des signaux de pression filtrés en différents points de la chambre de tir les temps de montée à 95% vers P_{qst} . Les résultats pour des charges de TNT sont répertoriés dans le tableau II.3 pour plusieurs taux de chargement.

On remarque essentiellement que, pour cet auteur, et pour des taux de chargement inférieurs à 0,6 kg/m^3 (où l'oxygène de l'air est en excès), le temps de montée t_m augmente avec la quantité d'explosif. Cette tendance dépend a priori du type d'explosif, et également de la configuration globale de l'expérience comme nous le verrons par la suite. On peut toutefois s'étonner de cette conclusion : pour un explosif donné, cela signifie que la vitesse globale de réaction n'est pas indépendante de la masse de réactifs. Cette assertion sera critiquée et revue plus en aval dans ce mémoire.

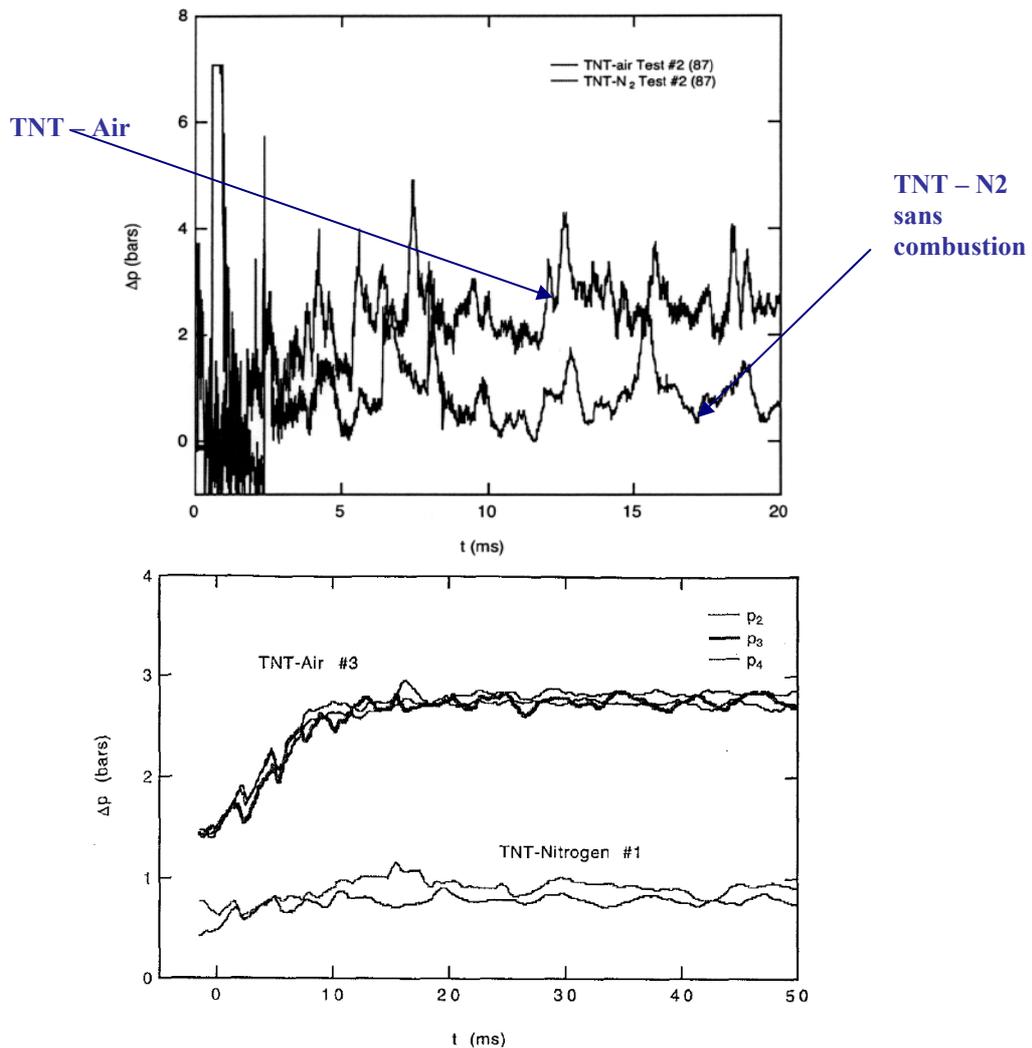


Figure II.12 D'après [113] – en haut, signaux de P expérimentaux obtenus lors de la détonation d'une charge de TNT en milieu clos, sous air ou sous azote – en bas : signaux filtrés et lissés de pression quasi statique en trois points de mesure

Charge Mass (kg)	Loading Density (kg/m ³)	TNT-Air
		Time to reach 95% QSP (ms)
1.1	0.042	28.9
4.0	0.154	34.1
7.7	0.296	49.1
18	0.692	18.8
26	1.000	11.6

Tableau II.3 – Temps de montée à 95% de P_{qst} selon Ripley [105] pour des explosions cylindre TNT / Air

D'une manière générale, les simulations numériques d'explosion à volume constant de la littérature représentent des cas simples : explosion d'une sphère dans une chambre sphérique, explosion dans une chambre cubique. Lorsque le scénario est plus compliqué, des choix doivent être effectués : tous les phénomènes ne sont pas pris en compte. Par exemple, la figure II.13 issue de [91] montre un résultat de simulation d'une explosion dans une infrastructure de 5 pièces et un

couloir. L'auteur ne prend pas en compte la combustion secondaire des produits de détonation mais se focalise sur la propagation des ondes de choc et l'écoulement des produits de détonation au travers des différentes ouvertures. La présence de plusieurs murs, ou de surfaces de réflexion pour les ondes de choc rend la modélisation du mélange des espèces gazeuses très coûteuse en termes de temps de calcul.

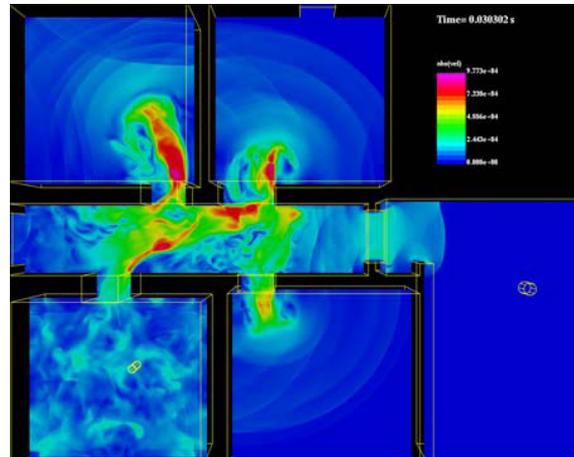


Figure II.13 – Simulation numérique, sans combustion d'une explosion dans une infrastructure complexe, d'après [91]

Si l'équilibre de pression est rapidement atteint, ce n'est pas le cas de l'équilibre thermique. La mise en mouvement des gaz par les ondes de choc réfléchies n'est pas suffisante pour homogénéiser le champ de T. Au contraire, les gaz chauds ont tendance à se trouver confinés à proximité du lieu de l'explosion (selon la taille relative du volume d'étude). Les codes hydrodynamiques déjà évoqués utilisent la plupart du temps l'énergie interne comme variable principale. Le champ de température est obtenu grâce à l'équation d'état utilisée. Selon la complexité de l'algorithme et du jeu d'équations initial, la possibilité d'utiliser une EOS fiable peut être réduite. La précision sur T est directement liée à ce choix.

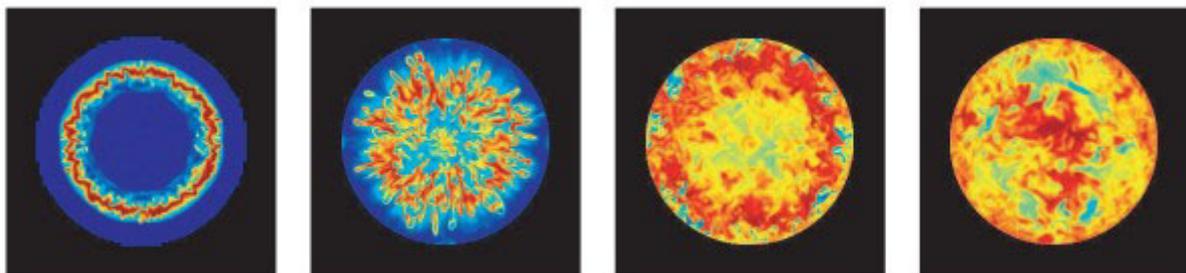


Figure II.14 Evolution de la température dans une chambre cylindrique de 6.6 litres à 30 μ s, 100 μ s, 400 μ s et 2.5 ms, d'après [116], après détonation d'une charge de TNT

La validation expérimentale de ces simulations se heurte encore aujourd'hui à d'importantes difficultés métrologiques. Deux types de mesures sont classiquement réalisés en physique des explosifs pour quantifier la température des produits de détonation : il s'agit d'une part de mesure ponctuelle, par pyrométrie à 2, 4 ou 6 longueurs d'ondes, (afin de déterminer une température en aval d'une onde de détonation par exemple), ou des mesures de type spectroscopie optique. Dans le problème posé ici, il s'agit de pouvoir mesurer une grandeur thermodynamique dans un milieu en combustion, en expansion puis en mélange turbulent, en présence d'ondes de choc multiples. L'utilisation de thermocouples pour une mesure intrusive est difficile comme nous l'avons vu dans

la première partie. Le comportement mécanique du pont thermique face aux chocs et la dégradation du couple métallique dans l'atmosphère de travail sont les principales raisons de l'échec des thermocouples. La préservation de la tenue tout au long du processus du capteur se fait au détriment du temps de réponse. Au CEA Gramat, des thermocouples de type K, N et B ont été tout de même utilisés lors d'expérimentations de détonation en milieu clos. Les résultats de ces mesures ponctuelles, seulement évoqués dans ce mémoire, permettent de comparer les effets thermiques, ou plus précisément l'inertie thermique du système, en fonction du type d'explosif testé.

En ce qui concerne une détonation en champ libre, nous avons menés plusieurs travaux de recherche afin, d'une part de caractériser les propriétés optiques des produits de détonation d'un explosif, d'autre part de déterminer de manière non intrusive une température apparente de la boule de feu. Ces travaux sont évoqués ci-dessous, ainsi que les principaux résultats de la littérature portant sur ce sujet.

Effets thermiques et signatures optiques d'une explosion

Ce problème est en effet d'actualité. Plusieurs articles développent des méthodes optiques non intrusives mises au point afin d'évaluer le rayonnement spectral, dans le visible ou l'infrarouge, des produits gazeux issus de la détonation d'une charge explosive [121 à 130]. En Russie, on citera principalement les travaux de Gel'fand [129]. Sur la figure II.15, on observe les courbes obtenues par pyrométrie à 2 longueurs d'ondes en un point de la surface des DP en expansion, pour plusieurs explosifs usuels. Les niveaux élevés constatés en début de phénomène correspondent à l'ionisation de l'air et à la détente initiale des gaz. Sur un intervalle de 10 ms, les produits de détonation en combustion avec l'air environnant ont une température comprise entre 1500 et 2000 K. Les techniques décrites par l'auteur ne permettent pas une mesure plus longue à cause des niveaux de bruit. Au Canada, les travaux de Goroshin et Yoshinaka [127] font également office de référence. Les auteurs recensent des températures de surface maintenues à des niveaux de l'ordre de 1800 K pendant les 50 premières ms du développement de la boule de feu. Ces travaux sont difficilement comparables aux travaux russes par exemple, tant les solutions technologiques retenues sont différentes (longueurs d'ondes d'observation), ainsi que la nature des charges explosives.

D'autres organismes, tel que le laboratoire de US Air Force [121 à 125], ont recensé, à des fins de détection d'une explosion, les signatures optiques de la détonation de charges militaires. Ces travaux conduisent notamment les auteurs à tracer des signaux caractéristiques de la luminance spectrale émise par les gaz chauds pour chaque type de bombe étudié. Les résultats sont cependant difficilement exploitables tant il réside des différences entre chaque arme testée (confinement par une enveloppe métallique, géométrie initiale, etc.)

Au CEA Gramat, deux thèses de doctorat [131, 132] et un mémoire de fin d'études [133] menés en parallèle aux présents travaux (en collaboration avec l'université Paris X) ont permis de lever un certain nombre d'inconnues. La thèse de P. Vasseur [131] a permis en condition de laboratoire d'estimer la profondeur optique et l'émissivité de produits de détonation fortement chargés en particules de carbone, comme cela est le cas pour le TNT par exemple. Les DP du TNT se comportent comme un corps gris sur une large bande spectrale, la profondeur optique des gaz étant également inférieure à 1 cm, ce qui est conforme aux résultats de la littérature. La thèse de D. Ramel [132] a permis de mettre au point un système de mesure non intrusif, basé sur le principe de la pyrométrie à deux longueurs d'ondes (choisies voisines l'une de l'autre), afin de mesurer la

température de surface de boules de feu de TNT. Ce système nous a permis de mesurer une température moyenne de l'ordre de 1300 K sur une durée de 100 ms, de 1800 K sur les 40 premières ms. En accord avec les résultats de la littérature, ces données permettent seulement de comparer les effets thermiques des explosifs classiques les uns par rapport aux autres.

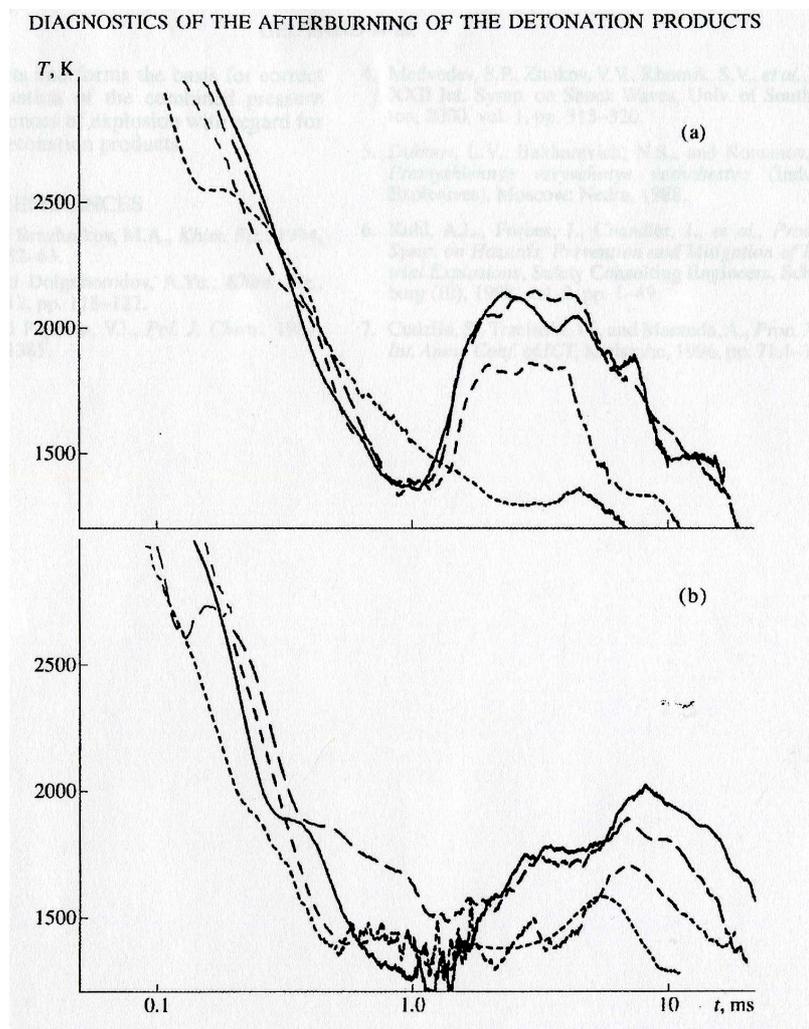


Figure II.15 D'après [129], température de surface d'une charge de TNT lors de son explosion, suivant deux points de mesure, sur 10 ms. Les différentes courbes correspondent à des angles d'observation différents

Citons enfin que, en parallèle de ce travail de thèse, des travaux de développement d'un moyen de mesure intrusif de la température de gaz chauds ont été entamés. Ce moyen devrait permettre de réaliser des mesures simultanées de T en plusieurs points en paroi d'un volume soumis à une explosion. Si une solution technique existe, il n'y a pas à la date de rédaction de ce mémoire de jeux de résultats permettant de conclure sur le champ de température engendré par la détonation d'un explosif.

En conclusion, pour ce qui concerne les effets thermiques d'une explosion d'une charge secondaire classique, on trouve dans la bibliographie une somme de résultats chiffrés qui permettent de comparer, sur des intervalles de temps très disparates, les températures apparentes des gaz chauds issus de la détonation et de leur combustion secondaire. Une description précise du champ spatio

temporel de T, tant en milieu clos qu'en champ libre reste encore inaccessible même si les niveaux de températures peuvent être estimés.

Ce constat est important. Les solutions expérimentales que nous avons choisies pour estimer les effets thermiques d'une explosion découlent de cette constatation. Elles sont décrites dans la suite de ce mémoire et en annexe B. Il s'agit d'une méthode indirecte basée sur le post-traitement des signaux de surpression et les enregistrements numériques du rayonnement des gaz chauds dans le spectre visible par vidéo numérique ultra rapide.

II.1.2 Analyse des résultats bibliographiques

En complément des références déjà cités dans le chapitre précédent, on s'intéresse ici de manière plus précise aux résultats chiffrés publiés, ayant servi à orienter notre étude. De nombreuses publications du monde militaire traitent des effets d'une explosion d'une charge cylindrique, sphérique, et parfois confinée par une enveloppe métallique. Les explosifs secondaires militaires sont également nombreux, chargés ou non en particules métalliques afin d'améliorer leur performance en effet de souffle, mais sont d'une manière générale, constitués d'un nombre restreint de matériaux énergétiques parmi lesquels figurent au premier plan le TNT et l'octogène (HMX).

Comme nous l'avons vu, une donnée essentielle pour modéliser et quantifier les effets d'une explosion en milieu clos est l'énergie totale libérable par l'explosif. A minima, il est nécessaire de connaître l'énergie de combustion totale de la charge, l'énergie libérée étant théoriquement calculable le long des deux chemins de réactions suivants :

- détonation dans un volume V puis combustion secondaire totale des DP, à volume constant, oxygène en excès ;
- combustion totale de l'explosif solide, à volume constant, oxygène en excès.

Plusieurs entités de recherche militaires ont réalisé à cette fin, mais également dans le cadre de l'étude des propriétés physico-chimiques des explosifs, des expériences de calorimétrie de combustion et / ou de détonation. Dans ce monde aux publications restreintes et identifiées, les travaux de Ornellas et Dobratz [79, 80, 81] font office de référence, bien qu'ayant été effectués entre 1960 et 1980. Ornellas utilise un calorimètre de détonation afin de déterminer sous différentes atmosphères de travail (air, oxygène, azote ou argon) l'énergie de détonation des explosifs secondaires. D'autres auteurs ont depuis repris ces études, et mis au point des méthodes de laboratoire (bombe calorimétrique, calorimètre iso péricole) afin de déterminer les énergies mises en jeu. Toutefois, au sein d'une littérature dense mais au formalisme réduit imposé (pour des raisons de confidentialité notamment), les protocoles expérimentaux sont décrits de manière succincte. Par exemple, le confinement initial (creusets ouverts ou fermés), qui joue sur la composition chimique aux temps courts, et la forme initiale de l'explosif sont peu détaillés pour les expérimentations de calorimétrie de détonation. Egalement, les compositions chimiques exactes des matériaux énergétiques sont rarement explicitées, alors que la présence de liants inertes ou réactifs ou de produits auxiliaires est symptomatique des capacités de fabrication de chaque pays. Il en résulte une dispersion des valeurs de l'énergie de détonation et de l'énergie de combustion secondaire. Dans le but de modéliser de manière fine les effets d'une explosion en milieu clos, il est nécessaire de déterminer a priori les valeurs de ces énergies (ou au moins une).

On citera par exemple les résultats de la littérature pour le TNT : dans les références [77 à 83] et [84,85], l'énergie de détonation prend des valeurs comprises **entre 3,93 et 4,8 MJ/kg, pour une moyenne de 4,397 MJ/kg et un écart type de 0,282 MJ/kg** (sur un échantillon de 10 valeurs trouvées).

A noter que **la valeur de référence d'Ornellas est de 4,567 MJ/kg**. Cette valeur est d'autant plus utilisée que l'auteur décrit de manière détaillée le protocole expérimental suivi : cette valeur correspond à la détonation d'un échantillon de TNT placé dans un confinement initial massif en or, ce qui a pour conséquence une détente à l'équilibre des produits de détonation. On se rapproche ainsi d'une explosion à pleine échelle, i.e. pour laquelle la charge est importante ou initialement confinée. Ornellas a réalisé sous des conditions identiques des expérimentations de détonation de charges de petites tailles et non confinées. L'énergie récupérée par le calorimètre peut varier de près de 40 %.

Ces constats et remarques montrent que même si on peut représenter le chemin thermodynamique suivi par les produits de détonation lors d'une explosion en milieu clos de manière simple et synthétique, il reste très difficile de connaître le chemin réellement parcouru. La composition des DP à l'issue de la détonation est une inconnue qui nécessite de formuler des hypothèses parfois contraignante. De même, la validité des expérimentations à petite échelle est de ce point de vue discutable.

Les résultats chiffrés sont également nombreux en ce qui concerne la pression dite quasi-statique atteinte lors d'une explosion dans une infrastructure résistante [86 à 101]. Un recensement de ces données a été effectué en amont de nos travaux [86, 87] et est présenté sur les figures II.17 à II.20. On constate, malgré le nombre, une forte dispersion des résultats pour un même ratio masse de la charge (en kg) sur le volume de l'enceinte ou de la pièce cible (en m³).

Cette dispersion peut s'expliquer tant sur le fond (l'objectif des travaux) que sur la forme (protocoles expérimentaux suivis). Pour clarifier ou expliquer l'ensemble des résultats répertoriés, on partage en deux catégories les sources potentielles d'écart (ou d'erreur):

- *Explications intrinsèques aux conditions expérimentales :*

- Conditions initiales de l'expérience : P_0 , T_0 et surtout l'hygrométrie, rarement indiquée ou relevée (l'humidité étant une donnée essentielle, nous le verrons par la suite)
- La nature du caisson ou de l'enceinte de tir :
 - conditions limites aux parois (métal, peinture de protection, béton,...),
 - déformations, au cours du tir et résiduelle, faisant varier le volume d'étude,
 - la forme intérieure de la chambre de tir (renforts, géométrie globale,...),
 - l'étanchéité totale ou partielle, ou la présence d'évents, etc.
- La nature exacte de l'édifice pyrotechnique,
 - un explosif portant le même nom a parfois des compositions chimiques sensiblement différentes selon le fabricant.

- La présence d'un explosif renforçateur et le type d'amorce sont rarement indiqués, même pour des explosifs à forts diamètres critiques, pour lesquels le système d'amorçage n'est pas négligeable.
 - La présence d'éléments plastiques potentiellement combustibles.
 - Les technologies de mesure employées :
 - Mesure de surpression interne par des capteurs piézoélectriques ou piézo résistifs,
 - Dérive thermique des senseurs face aux flux conductifs et radiatifs,
 - La fonction de transfert exacte des capteurs n'est pas connue ou pas indiquée (fréquence de coupure, temps de montée,...).
- *Explications liées à l'analyse des résultats bruts et aux objectifs de l'étude :*
- Les ratios m/V explorés couvrent un large domaine, l'air étant dans certains cas en défaut ou à la limite de la stœchiométrie pour assurer une combustion totale des DP.
 - Le post-traitement appliqué aux mesures de P est fonction d'une part de la qualité du signal (cf. ci-dessus) mais aussi de la définition des grandeurs que l'ont veut mesurer, en l'occurrence ici de P_{qst} .

Ces différents items sont plus ou moins développés dans la littérature disponible. En ce qui concerne les chaînes de mesure, les informations sont très parcellaires. Les tracés des signaux bruts sont également rarement donnés. Les résultats chiffrés les plus anciens (1960 à 1980), faisant parfois office de référence, sont peu exploitables en l'état tant il réside des inconnus sur les performances des chaînes de mesures utilisées (fréquences de coupure, erreur statique, dérives,...). La définition de P_{qst} , comme indiquée précédemment, évolue également selon les pays et les époques. La mesure de la valeur de « plateau » traduisant les effets de combustion et aujourd'hui communément admise demande des moyens de mesure efficaces. La définition des ouvrages de dimensionnement de structure diffère sensiblement, pour prendre en compte une valeur dite « à l'origine » de P_{qst} , comme le montre la figure II.16. Pour un même signal pris sur une même base de temps, la différence entre les valeurs obtenues par les deux définitions peut atteindre des valeurs supérieures à 5 % selon la méthode de dépouillement choisie (lissage, filtrage, etc.).

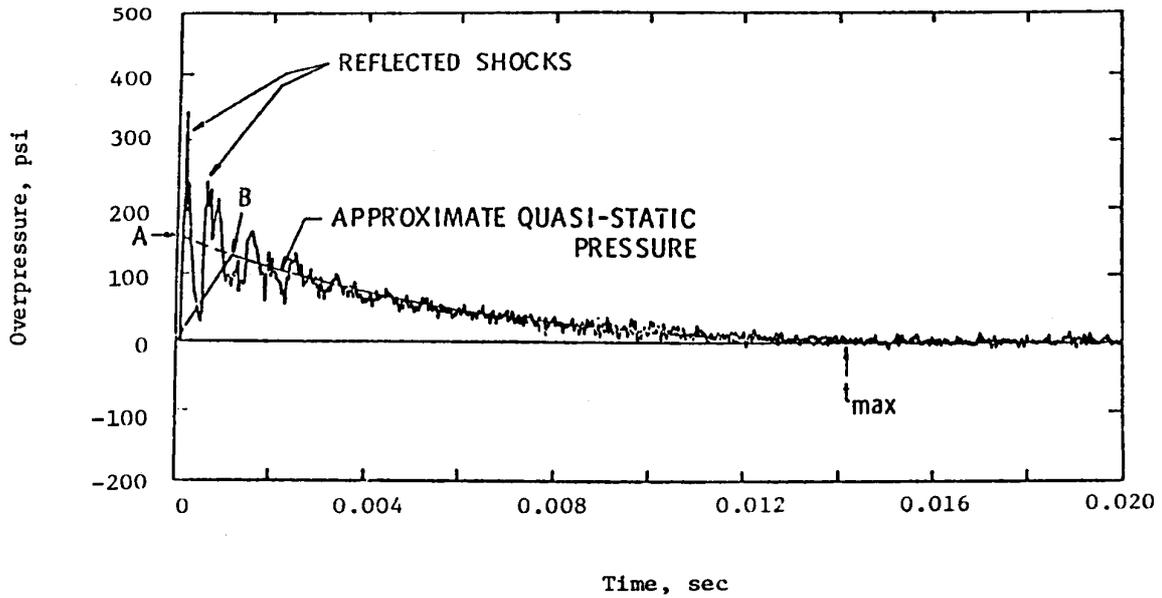


Figure II.16 Détermination de P_{qst} dans une optique de dimensionnement d'une structure – valeur dite de « pente à l'origine »

Par ailleurs, de nombreux rapports techniques ou communications scientifiques du monde militaire se consacrent à l'étude de cas complexes : plusieurs salles, charge explosive confinée par une enveloppe métallique, murs partiellement détruits lors de l'expérience, etc. Ces expériences, bien que nombreuses, sont difficiles à exploiter, faisant bien souvent uniquement l'objet d'une analyse post-mortem (taux de destruction) ou d'une évaluation par seuil des effets de surpression ou thermique.

Les graphiques suivants illustrent ces propos. Si l'on considère tout d'abord uniquement l'ensemble des résultats disponibles pour le TNT, il est possible de tracer l'évolution de P_{qst} en fonction du taux de chargement, malgré la dispersion des données. Sur les figures II.17 et II.18, les barres d'erreur correspondent arbitrairement à des écarts de 10 % autour de la valeur relevée. On constate un comportement globalement linéaire de P_{qst} par rapport à m/V . Ceci peut se mettre en équation en considérant de manière simplifiée la relation pour un gaz parfait reliant l'énergie totale E_{tot} libérée par unité de masse et le volume V de la pièce à la surpression finale atteinte :

$$\Delta P_{qst} = (\gamma - 1) \cdot m \cdot E_{tot} / V$$

avec ΔP_{qst} en Pa, E_{tot} en J/kg, γ constante des gaz parfait (prise égale à 1,4 ici) et m la masse totale de réactifs en présence (explosif + air) en kg. Ce résultat est directement déduit de l'égalité $VdP = (\gamma - 1) \cdot C_v \cdot dT$ pour une transformation à volume constant sans échange avec l'extérieur. En effet, pour un gaz parfait, constitué de n moles de gaz,

$$PV = nRT$$

$$PdV + VdP = nRdT$$

$$VdP = nMrdT \text{ car } dV = 0$$

$$VdP = mrdT$$

$$VdP = m(\gamma - 1)C_v dT$$

D'où

$$V\Delta P = m(\gamma - 1)E_{tot}$$

avec

$$E_{tot} = \bar{C}_v \Delta T$$

Ecrire ces relations revient à postuler que la montée en pression du système à volume constant est due à la conversion de l'énergie totale en négligeant l'augmentation du nombre de moles de gaz entre l'état détonné et l'état final.

En prenant l'énergie totale théorique de 14,53 MJ/kg correspondant aux équations de réactions écrites précédemment, le coefficient directeur de la droite de régression serait de $58,12 \cdot 10^5$ Pa/(kg/m³) contre $43,926 \cdot 10^5$ Pa/(kg/m³) obtenu pour le jeu de données de la littérature. Outre la dispersion initiale des valeurs expérimentales, cette différence s'explique par la méconnaissance des espèces produites par la détonation des charges explosives selon leurs modalités de mise en œuvre et de l'évolution couplée des concentrations de ces espèces le long de la détente et de la combustion des DP. De plus, à chaque situation correspond une qualité de réaction : confinement initial de la charge, longueur caractéristique de la salle, renforcement du mélange turbulent, etc. Enfin, prendre l'énergie totale dans cette équation simplifiée revient à considérer que la transformation est totale et idéale, ayant pour espèce finale H₂O, CO₂ et N₂. Nous verrons que, même favorisée, les réactions de combustion au cours d'une explosion en milieu clos laissent apparaître des traces résiduelles de produits carbonés.

La figure II.18 permet de comparer les résultats de la bibliographie pour le TNT avec les résultats de calculs théoriques obtenus par CHEETAH (module « explosion à volume constant »). Là encore, les résultats théoriques surestiment les résultats expérimentaux. En minimisant l'énergie libre du système, CHEETAH réalise le calcul d'une réaction que l'on peut qualifier d'idéale. On note également que sur l'intervalle de taux de chargement simulé, l'évolution de P_{qst} calculée est de type logarithmique.

Les figures II.19 et II.20 reportent une partie des résultats chiffrés trouvés pour différents explosifs : TNT, HMX, Tritonal ainsi que des explosifs composites de type RDX/TNT, Pentolite et Plastic. Des tendances linéaires de l'évolution de P_{qst} sont grossièrement affichées, malgré à nouveau des coefficients de régression R² faibles. Les segments de droite ainsi obtenus (figure II.20) mettent en lumière l'importance de la connaissance de l'énergie totale initialement disponible : comme on pouvait s'y attendre, plus le coefficient directeur de la droite est élevé, plus la valeur de E_{tot} est importante. Par exemple, la courbe du Tritonal est au dessus de celle du TNT, elle-même au dessus de celle de HMX, etc.

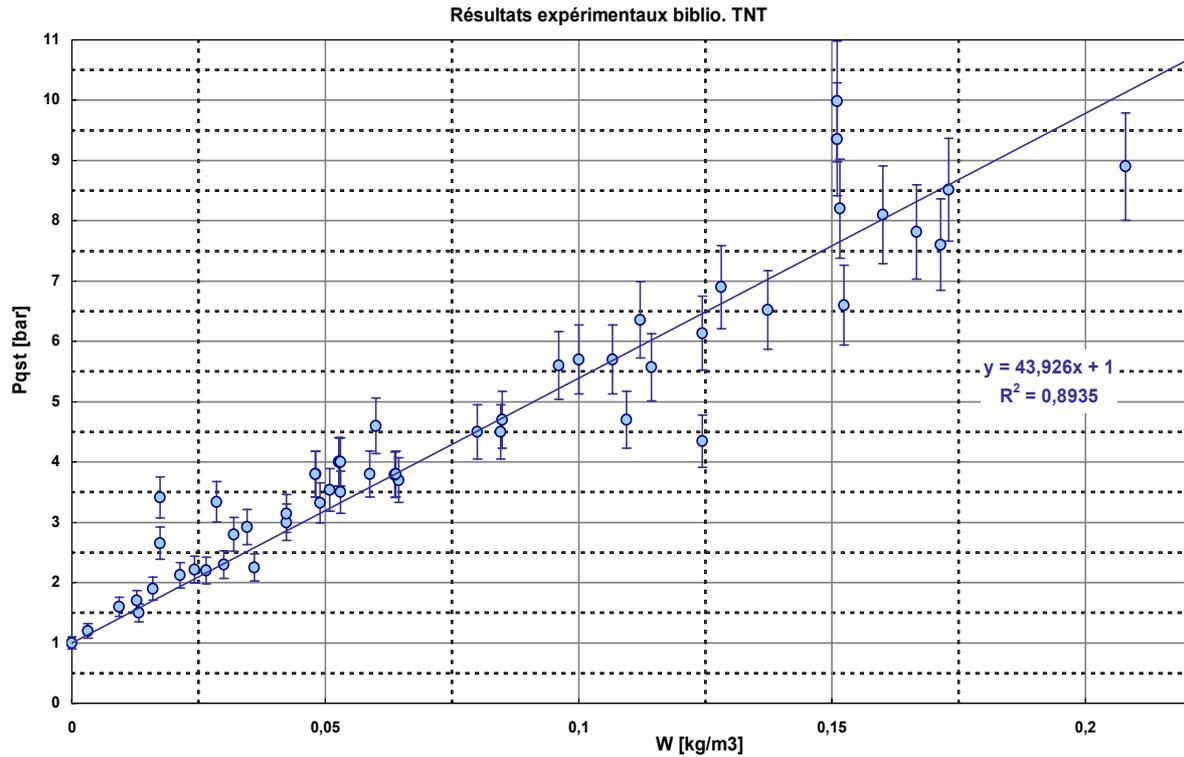


Figure II.17 Représentation graphique de P_{qst} - résultats de la bibliographie - pour le TNT en fonction du taux de chargement en kg/m^3 . Le coefficient R^2 est inférieur à 0,9.

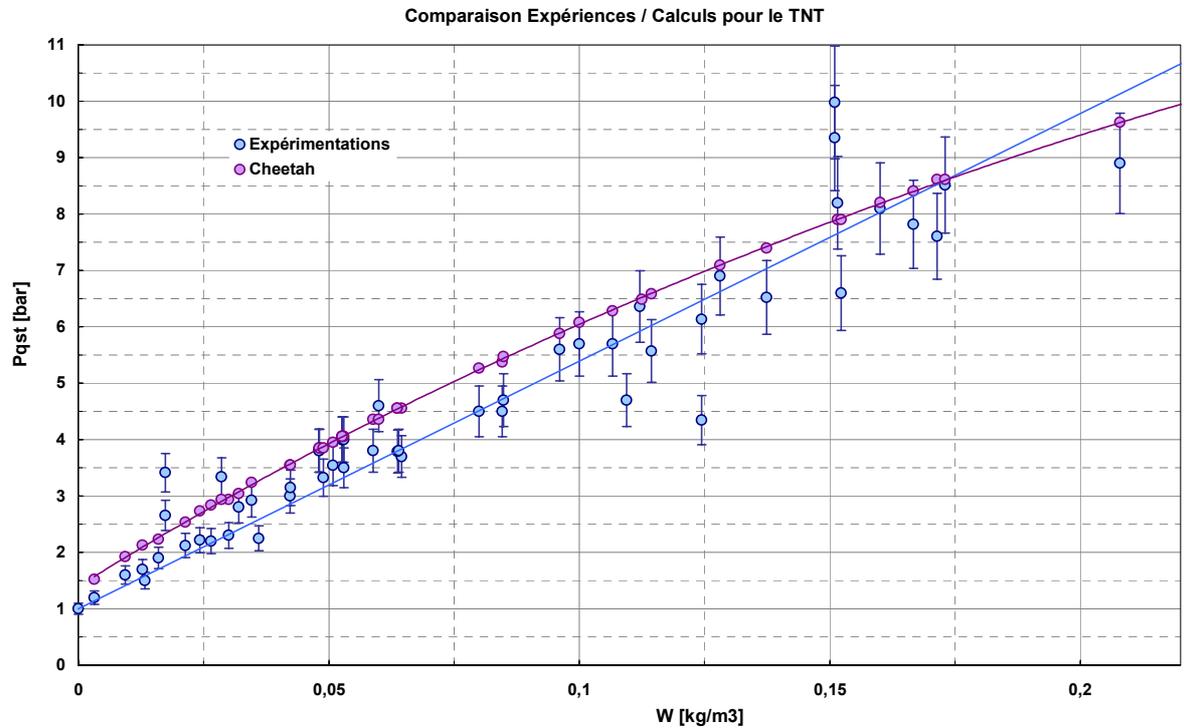


Figure II.18 Comparaison des résultats de la bibliographie pour le TNT et des calculs thermo-chimiques à l'équilibre (CHEETAH 2.0) pour des mélanges TNT/Air en fonction du taux de chargement.

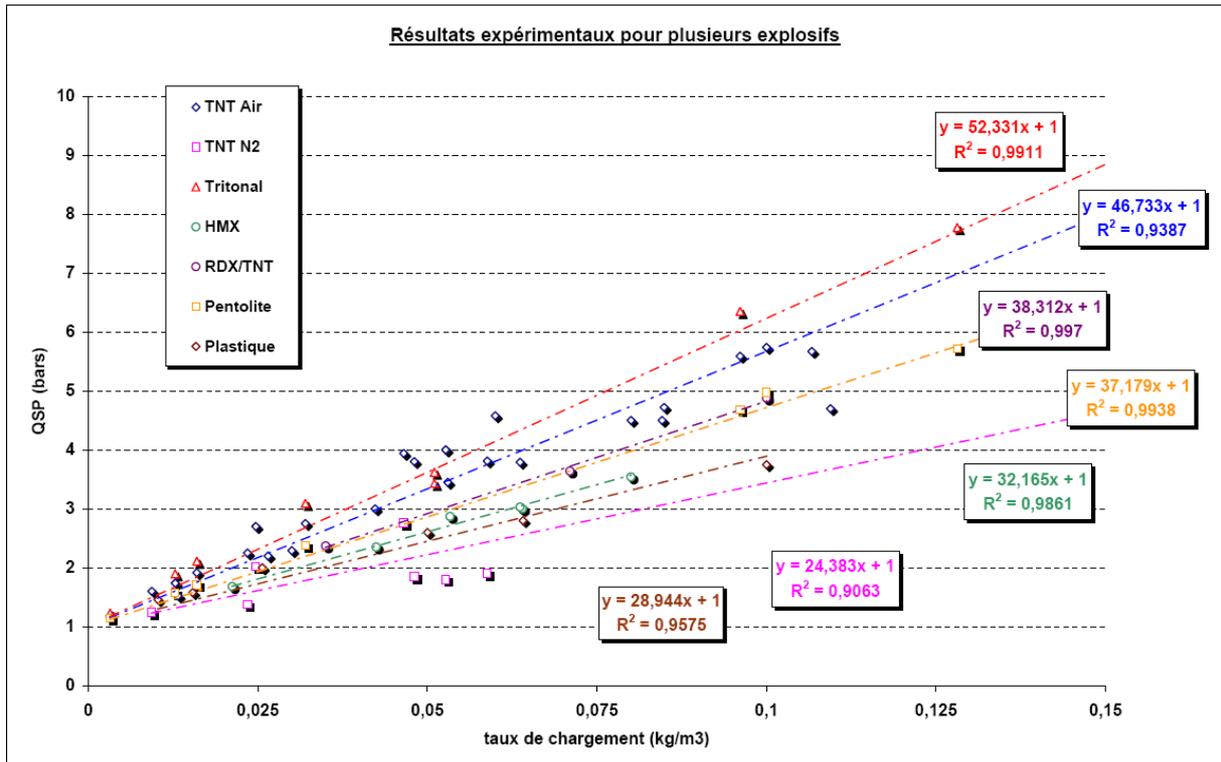


Figure II.19 Résultats expérimentaux bibliographiques de Pqst pour 6 explosifs en fonction de m/V. A noter la courbe rose pour des mélanges TNT/N2 – résultats affichés pour TNT/Air sur une base restreinte

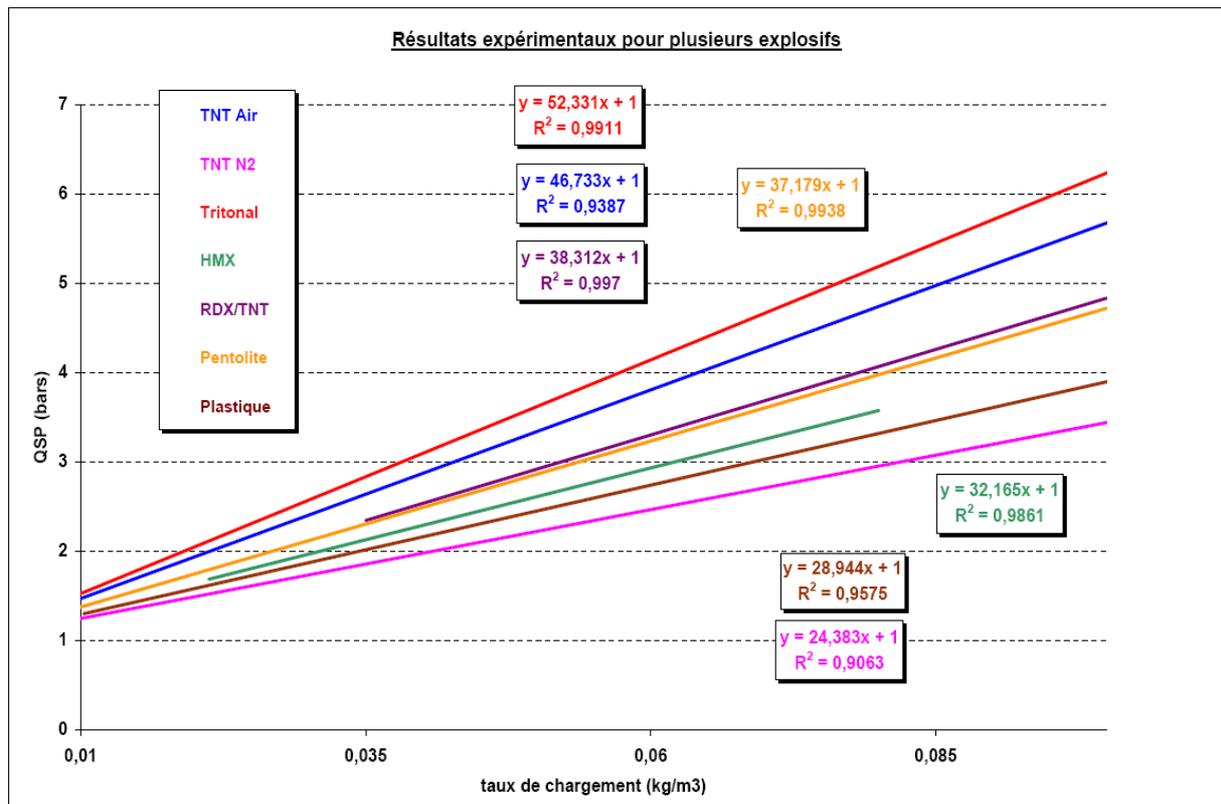


Figure II.20 Représentation des résultats bibliographiques de Pqst – approximation par un réseau de droites ou segments de droite

Cette analyse bibliographique justifie, dans le cadre de notre étude, dont un des objectifs est de caractériser par des couples [niveau, temps] le champ thermodynamique engendré par la détonation d'une charge explosive dans une enceinte fermée (ou partiellement ouverte), **la nécessité d'effectuer des expérimentations propres, aux conditions initiales et limites maîtrisées.**

Le post-traitement des mesures doit être constamment identique, pour pouvoir déduire la température de manière indirecte à partir des grandeurs accessibles.

Enfin, malgré des capacités de calcul grandissantes et les différentes méthodes numériques succinctement évoquées, les résultats numériques restent également peu nombreux (souvent « calés » sur ces mêmes résultats expérimentaux) et l'ensemble du problème physique à traiter ne permet pas d'envisager une simulation intensive réaliste de cas complexes. Il demeure donc bien une utilité à tenter de réduire le problème d'« explosion à volume constant » à un ensemble de modèles 0D(t) ou 0D.

II.1.3 Position de l'étude et méthodologie

De l'analyse précédente découlent les particularités de notre étude ainsi que le contenu de nos travaux décrits en partie II, dont le but est de répondre aux questions soulevées en partie I. Nous rappelons ces questions ici :

- Quels sont les champs de température et de pression auxquels peuvent être soumis des produits liquides en suspension (typiquement un nuage de gouttes) lors d'une explosion en milieu clos d'une masse m d'une matière explosive (typiquement un explosif secondaire) ?
- Compte tenu du scénario étudié et du (des) temps caractéristique (s) de libération du produit liquide dans l'atmosphère surchauffée, quelles sont les échelles temporelles liées au processus d'explosion isochore ?

Notre optique, pour cette partie de l'étude, consiste donc à identifier la dépendance par rapport aux temps de ces grandeurs et de quantifier les niveaux de P et T associés.

Plusieurs niveaux de modélisation sont dès ce point de l'étude envisageables. Par exemple, l'état quasi-stationnaire ou quasi-statique obtenu en fin de transformation isochore via le chemin [détonation + combustion secondaire] étant maintenu pendant plusieurs dizaines de millisecondes, il peut être assimilé à celui d'une combustion adiabatique des produits de détonation avec l'oxygène de l'air disponible. Il peut alors être estimé au moyen d'un calcul de combustion à volume constant de l'explosif avec l'oxygène de l'air présent dans la salle.

Par ailleurs, une étude de cas génériques, en faisant varier le taux de chargement W (en kg/m^3) ou la forme du volume, peut permettre de généraliser, pour une famille de matériaux énergétiques, la variation temporelle de la surpression interne que l'on sait être globalement homogène. Un modèle simple de $P(t)$ peut être construit.

Ces deux points sont développés dans la suite de ce chapitre. Pour parvenir à ces différents objectifs, la méthodologie suivante a été mise en place :

- Réalisation d'expérimentations de calorimétrie de combustion : détermination de l'énergie potentiellement libérable par l'explosif,
- Réalisation d'expérimentations « Bunker » : détonation d'une charge sphérique ou cylindrique dans une enceinte parallélépipédique, aux parois lisses, de volume égal à $1,875 \text{ m}^3$. Le bunker peut être étanche ou partiellement ouvert vers l'extérieur,
- Réalisation d'expérimentations de détonation dans la chambre Athéna, chambre globalement cylindrique, présentant de nombreux renforts métalliques sur sa paroi interne. Le volume de la chambre étanche est de $2,356 \text{ m}^3$
- Réalisation d'expérimentations de détonation dans la chambre Sirocco, de volume égal à 33 m^3 . Les parois internes de la chambre sont lisses.

Cette séquence a été élaborée en s'inspirant des travaux de Reichenbach et Neuwald [66, 67] de l'Ernst Mach Institute, réalisés au profit du LLNL. Les expériences décrites dans ces documents font office de référence quant à la reproductibilité des mesures de P , de la compréhension du

mélange turbulent entre les produits de détonation d'un explosif et l'air environnant, au sein d'une infrastructure simplifiée (mais comportant, par exemple, 6 pièces, et un couloir), et de la surpression qui en découle en chaque point du domaine d'étude. Les maquettes utilisées, à l'échelle du laboratoire, rendent possible l'utilisation de moyens optique de type interféromètre pour visualiser les champs de densité au sein de l'écoulement. Par contre, seules de très petites masses d'explosif sont employées, le moyen ne permettant pas de faire varier de manière sensible le taux de chargement. Il en résulte une détente rapide des produits de détonation et l'apparition d'une incertitude plus grande en ce qui concerne leur composition initiale. La balance en oxygène de la charge n'est pas non plus un paramètre de l'étude. Dès lors, pour combler ces zones d'ombres, nous avons pris le parti de réaliser des expériences sur un large intervalle de taux de chargement, au sein des volumes uniques, à la géométrie simple, cylindrique ou parallélépipédique.

La figure II.21 donne un aperçu des ces trois chambres de tir. Les détails de chaque enceinte et des protocoles expérimentaux sont donnés en annexe B.



Figure II.21 Vues d'ensemble des trois chambres de tir du CEA Gramat

Lors de chaque expérience l'oxygène est en excès par rapport aux réactions de combustion. Les DP peuvent être entièrement oxydés. On suppose les parois des chambres indéformables : en acier, ces parois ont des épaisseurs comprises entre 1 et 5 cm (en dehors des renforts ou soudures).

Les capteurs de pression utilisés pour mesurer la surpression interne sont protégés contre les effets thermiques engendrés par la charge explosive. Ce point a fait l'objet d'un travail de développement particulier nécessaire à la bonne conduite de la thèse. Il est évoqué en annexe B.

L'ensemble des tirs dits DMC fait l'objet d'un tableau récapitulatif, toujours en annexe. Plus de cinquante expérimentations ont été réalisées, non seulement pour faire varier les paramètres d'entrées mais également pour valider la reproductibilité des mesures. Le post-traitement appliqué aux signaux de pression va permettre de déterminer une valeur de P_{qst} comme nous l'avons défini dans ce mémoire, mais également de déterminer $P(t)$ en tout point de la salle d'une part, et d'évaluer par analyse fréquentielle le niveau de température atteint dans le volume sur un intervalle de temps donné d'autre part. En ce qui concerne la température interne, l'analyse des résultats se fera par type d'expérimentation : le protocole mis en place permet de mettre en évidence l'influence de la géométrie du volume et de la position relative de la charge.

Enfin, signalons que l'enregistrement par vidéo numérique rapide de la luminance (dans le spectre visible) émise par la détonation de la charge puis de la combustion des DP avec l'air, nous a permis

de comprendre la cinétique globale de réaction au sein du système, en fonction du type d'explosif utilisé, de la présence ou non de liquide et de la surface de fuite vers l'extérieur. Qualitativement, ces enregistrements permettent de comparer la durée des effets « thermiques ». Un dépouillement plus poussé des images obtenues, par exemple sur la couche « Rouge » d'informations, doit permettre de valider les hypothèses formulées quant à la variation de pression interne. Ces mêmes techniques de visualisation ont été utilisées lors de campagnes d'essais dites DCL qui nous ont permis de mettre en évidence les phénomènes de combustion secondaire des produits de détonation lors d'une explosion à l'air libre. Outre le rayon maximal de la boule de feu et une estimation de la température de surface, ces expérimentations permettent de comparer la durée des phénomènes lumineux (i.e. de rayonnement suffisamment intense dans le spectre visible pour être détecté par les caméras numériques) pour des charges de même masse, de même volume ou d'énergies chimiques disponibles équivalentes.

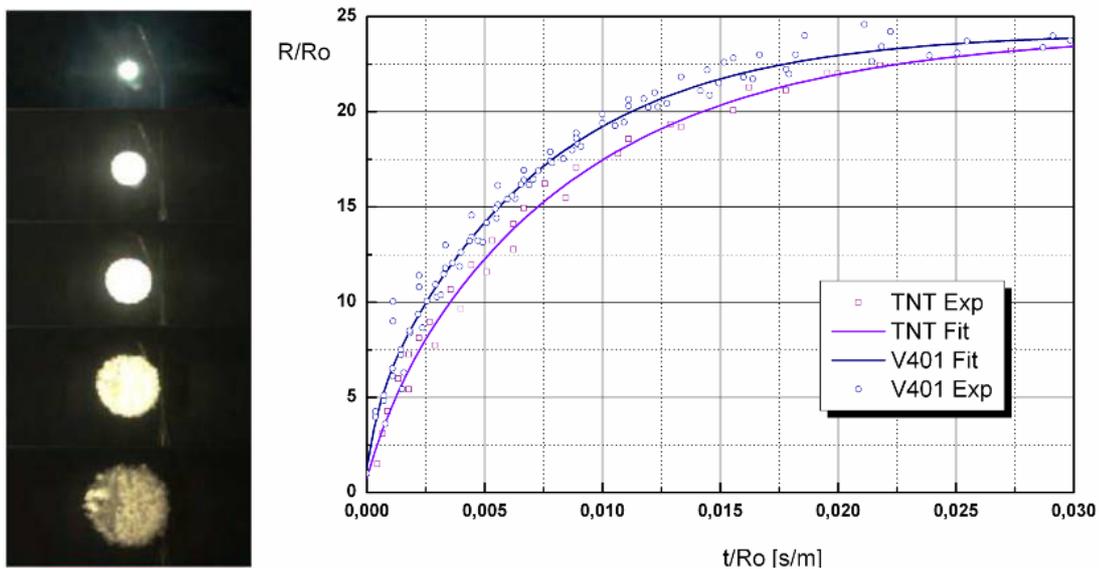


Figure II.22 Rayon réel de la boule de feu pour deux explosifs – résultats expérimentaux tirs DCL

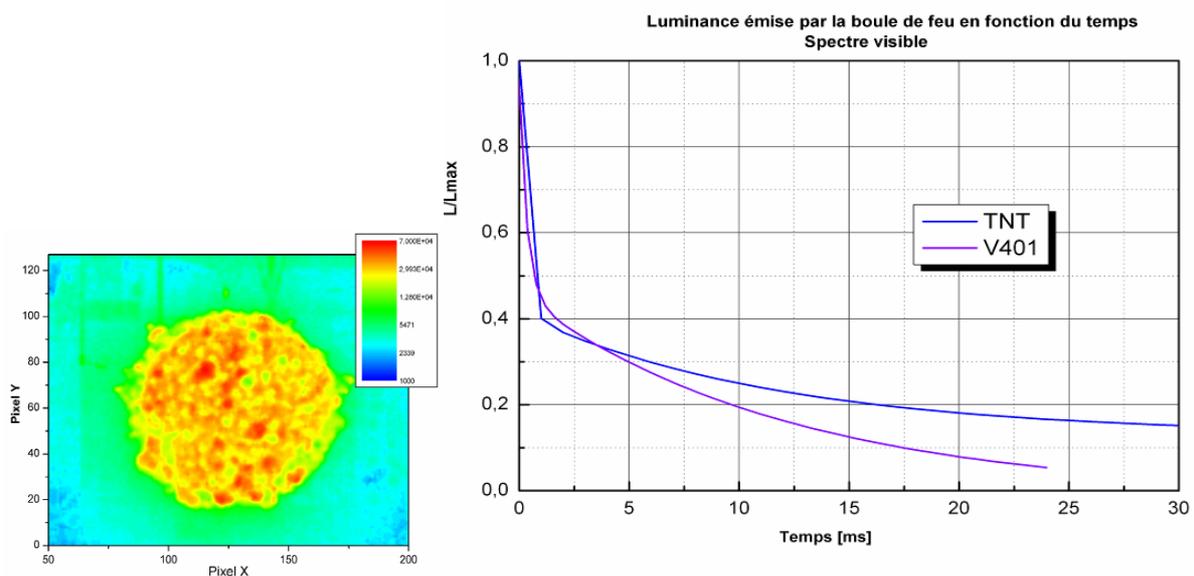


Figure II.23 Luminance émise par une boule de feu en fonction du temps dans le spectre visible (valeur moyenne sur la zone lumineuse détectée). En violet, courbe de l'octoviton, en bleu, le TNT.

La figure II.22 donne le rayon réel de la boule de feu d'une explosion sphérique pour l'octoviton et le TNT : pour ces deux explosifs, le rayon maximal avant réactivation par le train d'ondes est de l'ordre de 25 fois le rayon initial. Pour une masse de 1 kg, le rayon initial est de 52 mm, soit un diamètre final de 2,6 mètres.

Il faut également préciser que le temps de développement de la boule de feu est largement inférieur à celui du rayonnement des gaz chauds. Sur la figure II.22, le rayon se stabilise après un temps réduit t/R_0 de 0,03 s/m. Pour une sphère de 1 kg à nouveau, ce temps correspond à 1,56 ms. La figure II.23 montre par contre l'évolution de la luminance moyenne de la boule de feu pour ces mêmes explosifs, enregistrée grâce aux caméras numériques ultra-rapides (trois enregistrements sur trois temps de pose différents). Les courbes sont normalisées par rapport à la luminance maximale.

On relève par exemple les temps au bout desquels la luminance moyenne est de 20% de la pleine échelle :

- pour le TNT, ce temps est de 15,5 ms,
- alors que pour le V401, il vaut 9,8 ms.

A 10 % (limite de détectabilité), ces temps sont respectivement de 52 ms contre 17,5 ms.

Les produits de détonation du TNT démontrent une capacité à « brûler » nettement supérieure à celle des DP du V401. Le mot « brûler » est ici volontairement un abus de langage très répandu : les temps de fonctionnement enregistrés correspondent à une durée effective du rayonnement, mais on ne peut pas déduire de ce simple constat des conclusions fermes en ce qui concerne le régime de combustion des produits de détonation.

La durée de rayonnement est, à l'air libre, directement lié à la composition des produits de détonation, et à l'hydrodynamique de l'écoulement instable. Par exemple, pour le V401, le mélange est plus efficace en début de processus car l'onde de détonation engendre un gradient de densité à l'interface DP/air supérieur à celui du TNT.

Ces constatations à l'air libre constituent une simple indication pour le problème que nous étudions. En milieu clos, les ondes de choc réfléchies et le mélange turbulent induit par la configuration du volume d'étude doivent permettre une amplification ou un maintien des réactions, ou a contrario dans certains cas limites (présence de nombreux obstacles) leur extinction.

Ces remarques finales referment le développement de ce chapitre et introduisent le chapitre suivant, consacré à la modélisation d'une explosion en milieu clos.

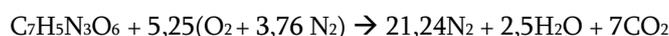
II.2 Modélisation des effets d'une explosion en milieu clos

II.2.1 Détermination des propriétés énergétiques des explosifs testés

Compte-tenu de la dispersion des résultats de la littérature, tant sur l'énergie de détonation que l'énergie de combustion, des mesures ont été effectuées pour les explosifs utilisés au CEA Gramat à l'aide d'un calorimètre iso péricole (annexe A). L'explosif, réduit en poudre, est initié en combustion sous une atmosphère à 30 bars d'oxygène pur. On mesure donc avec un tel dispositif une énergie de combustion à volume constant, à partir de laquelle il est possible de déterminer l'enthalpie standard de la réaction de combustion en prenant en compte le nombre de moles de gaz produites, via la relation :

$$\Delta H_{c(298K)} = \Delta E_{\text{comb}} + \Delta n_g R.T$$

avec R constante des gaz parfaits, et T = 298 K. Considérons la réaction de combustion théorique du TNT :



Si on suppose que toute l'eau se trouve en phase vapeur en fin de réaction, alors la variation de nombre de moles de gaz est ici de $\Delta n_g = 5.75$ moles. L'énergie correspondante est de 14,25 kJ à 298K, ce qui représente une énergie mille fois plus petite que l'énergie de combustion à volume constant.

Le tableau II.4 présente les résultats des expériences de calorimétrie pour quatre explosifs (TNT, HMX, Octoviton et Tritonal). L'écart relatif de la valeur retenue est également précisé pour un nombre d'expériences jugé satisfaisant. On note par exemple que pour le TNT, sur un nombre total de 22 expériences, l'écart type est de 0,58 %, ce qui constitue un résultat de très haute confiance.

De plus, à fin d'être le plus précis possible, une correction est apportée au résultat final en tenant compte de la contribution énergétique du système de mise de feu (par fil chaud). La masse de fil initiale ainsi que la masse résiduelle sont systématiquement pesées. La figure II.24 montre que, sur l'ensemble des expériences menées (soit un nombre supérieur à 50), 78 % du fil chaud est brûlé. La chaleur dégagée par la combustion du fil est connue.

Dans le même ordre d'idée, les résidus solides sont récupérés et pesés à l'issue de l'expérience. Pour les explosifs faiblement sous oxygénés, comme le HMX, ces résidus représentent une masse négligeable. Il faut toutefois noter que pour le TNT, malgré les conditions initiales (nombre de moles d'oxygène en excès, explosif réduit en poudre), la combustion n'est pas totale. Pour le TNT, sur un ensemble de 25 mesures, la masse résiduelle moyenne relative est de l'ordre de 2,2 % pour un écart type de 0,6%. Pour le HMX et l'octoviton, sur un ensemble de 20 mesures, les résidus représentent 1% de la masse initiale pour un écart type de 0,28%. La figure II.25 montre de manière explicite la distribution des résultats obtenus pour le TNT : elle représente la chaleur dégagée mesurée pour chaque essai, en fonction de la masse initiale de l'échantillon de poudre d'explosif, idéalement centrée sur 0,5 g (paramètre dépendant de l'opérateur).

Comportement du fil chaud

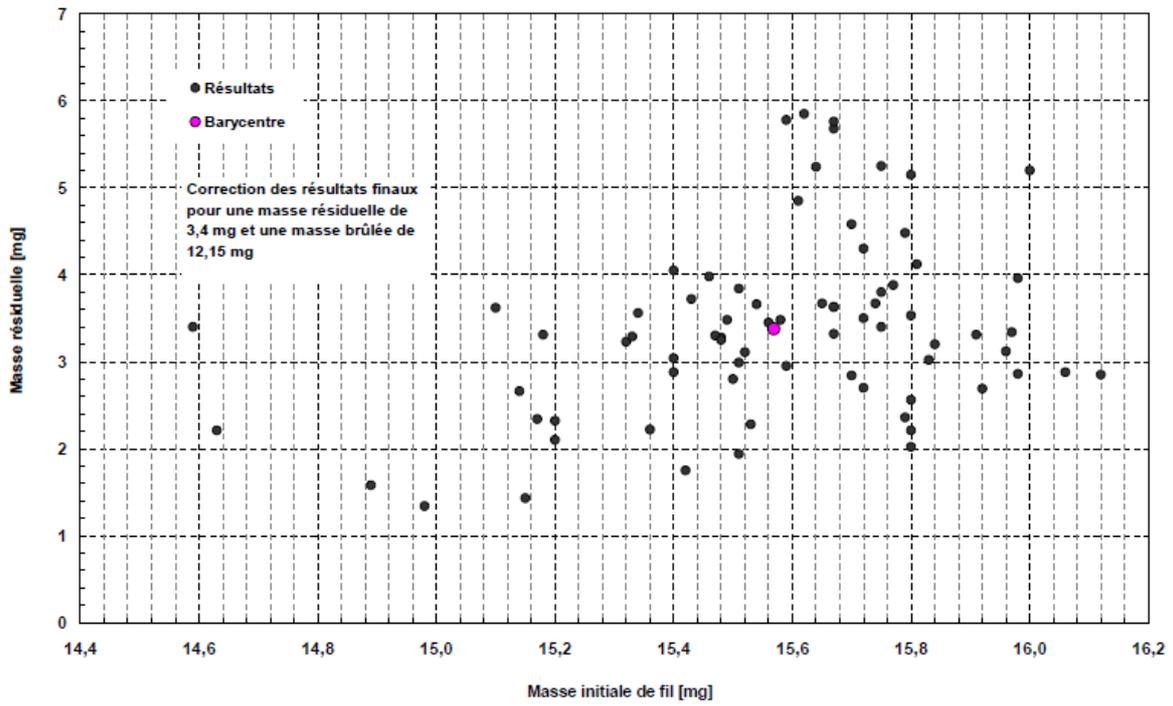


Figure II.24 Correction des résultats de calorimétrie pour tenir compte de la masse de fil brûlée

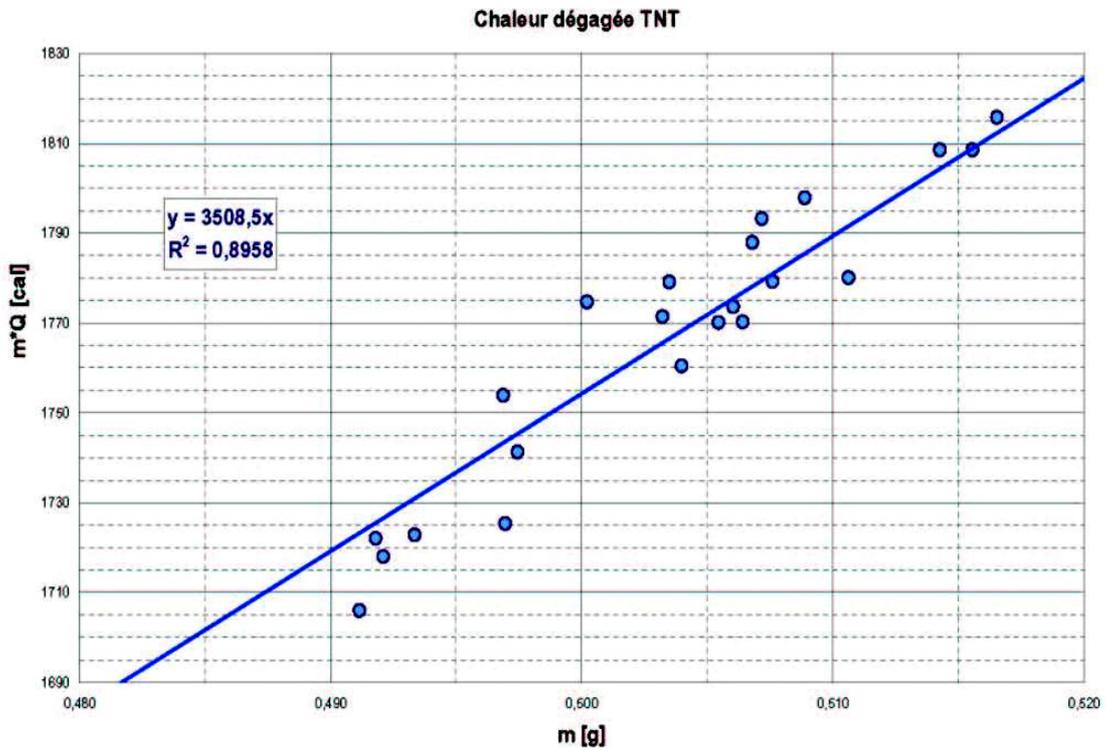


Figure II.25 Chaleur dégagée par un échantillon de masse m (en abscisse) voisine de 0,5 g

Au final,

- Pour le **TNT**, l'énergie libérée lors des expériences de calorimétrie de **combustion supposée totale**, prend une valeur après correction de **14,689 MJ/kg** pour un écart type de 0,086 MJ/kg,
- Pour le **HMX**, on retiendra la valeur de **9,464 MJ/kg**,
- Pour l'**Octoviton**, on retiendra une valeur de **9,678 MJ/kg**.

Explosif	Q(MJ/kg)	Commentaires
HMX		Sur 10 mesures - 8 valeurs retenues
Moyenne	9,464	
Ecart-type	0,047 0,50%	
Octoviton		Sur 10 mesures - 8 valeurs retenues
Moyenne	9,678	
Ecart-type	0,073 0,76%	
TNT		Sur 26 mesures - 22 valeurs retenues
Moyenne	14,689	
Ecart-type	0,086 0,58%	
Tritonal		Sur 5 mesures - 5 retenues
Moyenne	16,822	
Ecart-type	0,263 1,57%	

Tableau II.4 Résultats des expériences de calorimétrie de combustion pour 4 explosifs secondaires – Chaleur dégagée et écart type sur l'échantillon de mesure

II.2.2 Modèles de détermination de l'état quasi-statique

L'étape suivante consiste à modéliser l'état quasi-statique en fin de processus, dans le cadre restreint de l'intervalle de taux de chargement en explosif que nous nous sommes fixés. Comme précédemment, on se focalise sur deux explosifs, le TNT et le V401, qui ont des comportements *a priori* très éloignés.

Dans un premier temps, on présente les résultats des expériences de détonation en milieu clos, conduites au CEA Gramat. On rappelle que :

- La surpression quasi-statique est analysée de manière globale sur l'ensemble des résultats, quelle que soit la chambre de tir utilisée. On relèvera toutefois les indices révélateurs de l'influence de la géométrie du volume de travail.
- Par contre, les valeurs de température quasi-statique, estimées de manière indirecte à partir des signaux de surpressions, seront détaillées à la lumière des résultats obtenus pour chaque configuration de tir.

Dans un deuxième temps, on proposera deux solutions de modélisation thermodynamique afin de généraliser les résultats obtenus pour deux explosifs à une charge explosive quelconque.

II.2.2.1 Analyse des résultats expérimentaux

a. Détermination de P_{qst}

Après post-traitement des signaux de surpression interne, on détermine pour chaque expérience la valeur de P_{qst} en bar. Pour chaque signal, la valeur de P_{qst} est obtenue de deux manières différentes :

- par filtrage et lissage du signal de pression comme indiqué ci-dessous et détaillé en annexe. On rappelle ici que pour les expériences de type Bunker par exemple, une valeur est déterminée grâce à trois signaux de pression, obtenus par deux types de capteur, piézoélectrique et piézo résistif.

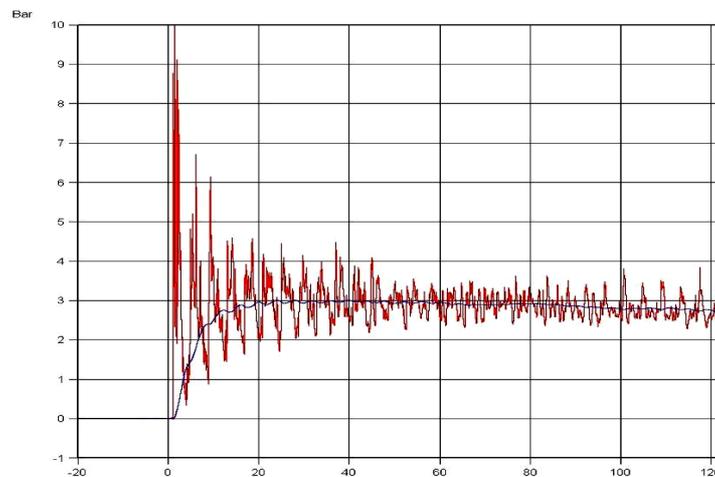


Figure II.26 Exemple de signal de surpression interne au volume. En rouge, signal brut mettant en évidence les ondes de choc réfléchies, en bleu, courbe obtenue après filtrage à 50 Hz faisant apparaître la composante continue

- par intégration du signal sur un intervalle de 50 ms comme l'illustre la figure suivante :

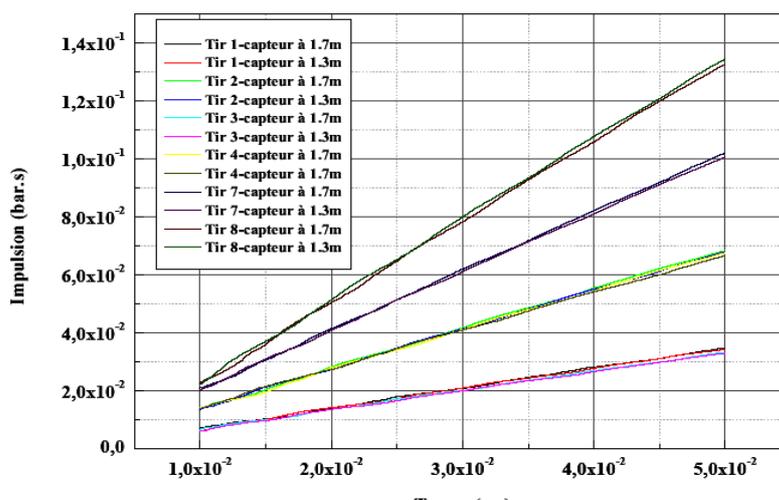


Figure II.27 Réseau de courbes obtenues après intégration des signaux bruts (abscisse : temps en seconde)

Sur ce graphique, on trace les courbes obtenues par intégration directe des signaux de surpression interne, sur l'intervalle de temps $[t_0 + 10 \text{ ms} ; t_0 + 50 \text{ ms}]$. L'intégration de P permet de mettre en évidence le caractère quasi-stationnaire de la surpression. L'intégrale du signal brut et celle du signal filtré sont égales, l'opération d'intégration faisant disparaître le contenu pseudopériodique du signal.

Les courbes peuvent être approximées par des segments de droite sur cet intervalle, segments dont les coefficients directeurs donnent directement la valeur de P_{qst} . La figure II.27 montre les résultats obtenus pour des tirs dans la chambre Athéna, lors de 6 essais distincts. Les tirs 1 et 3, puis 2 et 4 sont identiques. La masse d'explosif est croissante (tirs 1 et 3 - 50 g de V401, tirs 2 et 4 - 100 g, tir 7-150g, tir 8 - 200g). On constate que les essais sont d'une part reproductibles, et que d'autre part, quelle que soit la distance initiale [charge – capteur], les courbes d'impulsion de pression se confondent, ce qui est conforme à l'hypothèse d'une surpression quasi-statique homogène dans le volume d'étude. En effet, en deux points de mesure distincts, sur l'intervalle d'étude de W , les montées en pression diffèrent l'une de l'autre par le temps d'arrivée de l'onde de choc incidente. Cet écart reste négligeable par rapport à l'échelle temporelle du problème.

Ces deux types de dépouillement permettent de tracer les figures II.28 à II.30, qui présentent les résultats obtenus pour le TNT et l'octoviton, sur l'ensemble des campagnes expérimentales.

Chaque valeur de P_{qst} affichée est la moyenne d'au minimum six valeurs expérimentales. Les barres d'erreur associées correspondent à une erreur relative de 10 %. Cette valeur se justifie par :

- L'erreur statique de la chaîne de mesure (inférieure à 0,5%).
- L'erreur due aux variations des conditions extérieures (température, pression, hygrométrie) de l'ordre de 4%. Ce point est détaillé plus loin dans ce mémoire.
- La dérive thermique du capteur qui, bien que minimisée par l'apposition de protections adéquates, ne peut être totalement annihilée (inférieure à 1 %).

- L'erreur liée à la méthode de post-traitement choisie : la fréquence de coupure du filtre passe bas est fixée à 200 Hz. Une étude sur les conséquences de ce choix sur les valeurs de P_{qst} a été effectuée mais n'est pas détaillée ici. On retiendra que, selon la valeur de cette fréquence entre 50 et 400 Hz, l'écart relatif sur l'ensemble des valeurs de P_{qst} est inférieur à 5%.

La figure II.28 permet de comparer les pressions quasi-statiques pour les deux explosifs sur l'intervalle de taux de chargement $[0,02 - 0,12]$. Sur cet intervalle, on choisit de mettre en évidence un comportement quasi-linéaire de P_{qst} en fonction de W . Pour les deux explosifs, les coefficients de corrélation R^2 sont de l'ordre de 0,92 : cette valeur de R^2 est plus importante si l'on observe de manière dé耦plée les résultats pour chaque type de confinement. Par exemple, si on se focalise uniquement sur les essais de type bunker, le coefficient R^2 approche 0,98. Ceci montre que la forme du volume (ou plus généralement une longueur L caractéristique du système) a une influence sur le processus de combustion secondaire et de génération de P_{qst} .

Cependant, en conservant l'ensemble des résultats, on constate que :

- le segment de droite relatif au TNT se situe au dessus du segment de droite relatif au V401 quel que soit W sur l'intervalle donné, ce qui est conforme à nos attentes puisque le TNT possède une balance en oxygène fortement négative.
- Les coefficients directeurs des segments de droite, appelés Q_{exp} , sont de $45 \text{ bar} \cdot (\text{kg}/\text{m}^3)^{-1}$ pour le TNT, de $31,648 \text{ bar} \cdot (\text{kg}/\text{m}^3)^{-1}$ pour le V401.

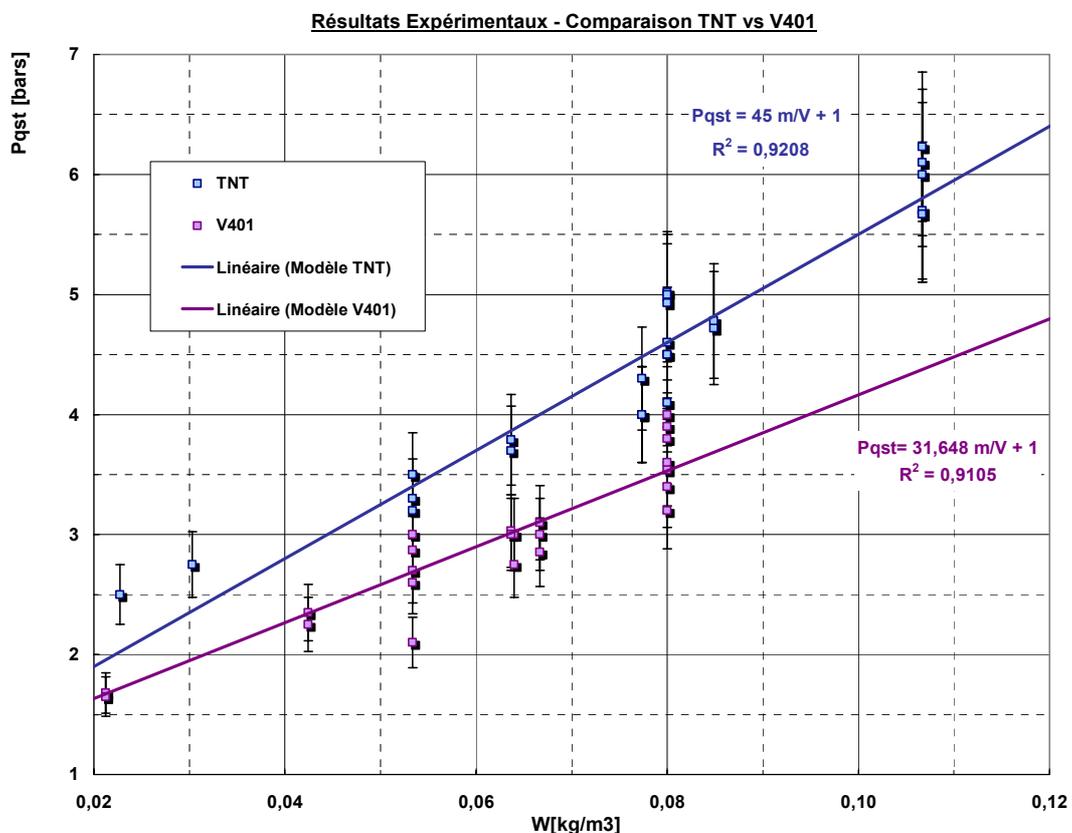


Figure II.28 Surpressions quasi-statiques mesurées en fonction de W pour le V401 et le TNT. Les traits pleins correspondent aux approximations linéaires associées.

Grâce aux expérimentations de calorimétrie de combustion, supposée totale, nous avons déterminé les valeurs de l'énergie de combustion totale *a priori* disponible pour chaque explosif. Ces valeurs, dans le cadre de l'approximation formulée au paragraphe II.2.1 correspondent respectivement à des coefficients Q ayant pour valeur :

- $Q_{\text{TNT}} = 58,76 \text{ bar} \cdot (\text{kg}/\text{m}^3)^{-1}$ contre une valeur expérimentale de $Q_{\text{TNT,exp}} = 45 \text{ bar} \cdot (\text{kg}/\text{m}^3)^{-1}$, soit un écart relatif de 23,4 %.
- $Q_{\text{V401}} = 38,712 \text{ bar} \cdot (\text{kg}/\text{m}^3)^{-1}$ contre une valeur expérimentale de $Q_{\text{V401,exp}} = 31.648 \text{ bar} \cdot (\text{kg}/\text{m}^3)^{-1}$, soit un écart relatif de 18,2 %.

Les figures II.29 et II.30 permettent de pousser cette analyse en comparant les résultats expérimentaux avec les données issues de calculs réalisés à l'aide du code Cheetah. Les résultats du calcul sont également donnés sous la forme d'un segment de droite sur l'intervalle d'étude.

- Pour les deux explosifs, les calculs thermodynamiques à l'équilibre d'explosion à volume constant surestiment les valeurs expérimentales.
- L'écart entre les deux approximations linéaires est de 12,2 % pour le TNT, et de 5,8 % pour le V401.

On rappelle ici que, pour le TNT, les résultats chiffrés de la bibliographie faisait l'objet d'une approximation linéaire dont le coefficient directeur Q était égal à $43.926 \text{ bar} \cdot (\text{kg}/\text{m}^3)^{-1}$, sur un intervalle de W plus large toutefois. Cette valeur est conforme à nos propres résultats.

La comparaison des résultats de calculs Cheetah avec nos résultats expérimentaux amène la remarque suivante : les bibliothèques d'espèces chimiques des codes thermochimiques ainsi que les équations de réactions qui les associent sont en partie validées ou calées sur des résultats expérimentaux : si l'on extrait de la bibliographie et si on ne considère que les résultats obtenus par le LLNL aux USA, dans une configuration constante, on obtient un coefficient directeur de $50,8 \text{ bar} \cdot (\text{kg}/\text{m}^3)^{-1}$ pour le TNT, ce qui est conforme à la valeur fournie par Cheetah.

Là encore, ces constatations amènent les remarques suivantes :

- Le pourcentage de l'énergie totale *a priori* disponible dans l'explosif, effectivement libérée et participant à la montée en pression du milieu dépend étroitement de la configuration de l'explosion.
- Sur l'ensemble des tirs effectués, pour trois configurations géométriques testées, la fraction de l'énergie totale (participant à la surpression quasi-statique) libérée est de 76,6 % pour le TNT, de 81,8 % pour le V401 (par rapport à un cas idéal).
- Le chemin thermodynamique réellement suivi par les produits de détonation au cours de leur détente et de la combustion secondaire couplée reste inconnu. Il en découle que la composition réelle finale du mélange l'est également.

Nous reviendrons plus loin sur ces derniers points, au travers notamment d'une modélisation thermochimique simplifiée.

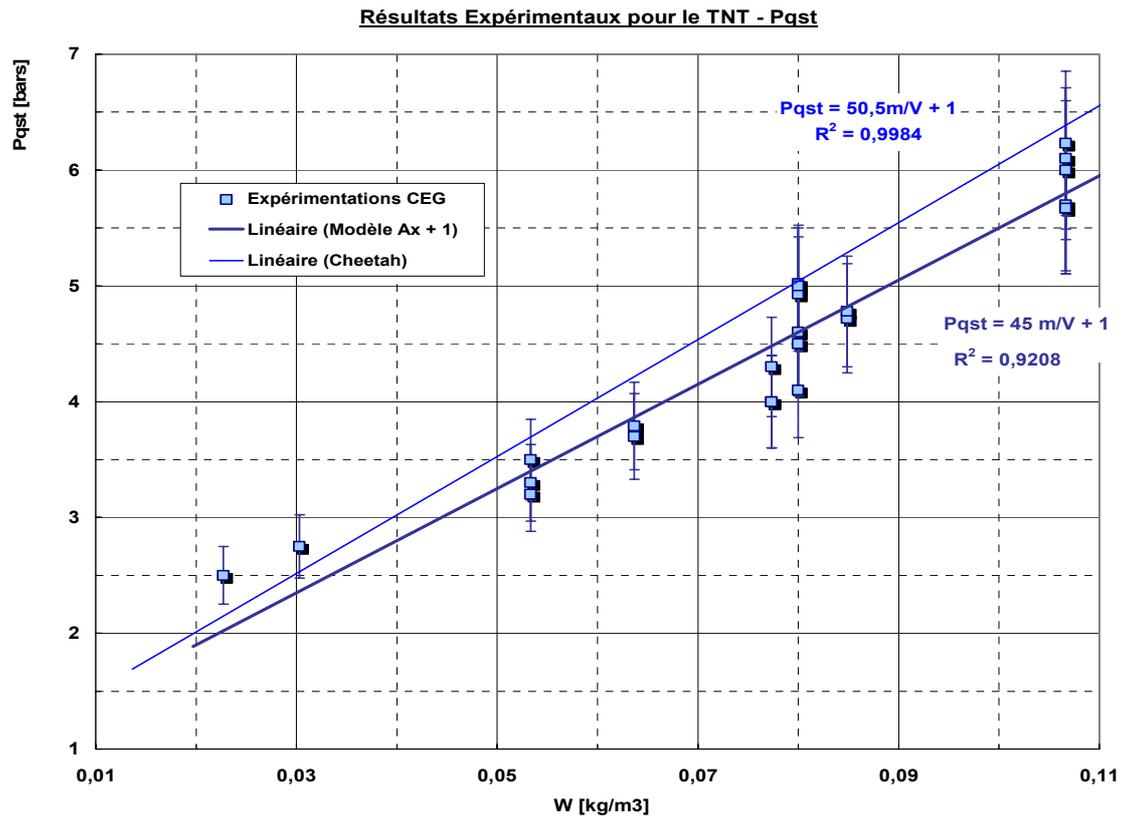


Figure II.29 Comparaison Expérience/Calculs pour la surpression quasi-statique, en fonction du w pour le TNT

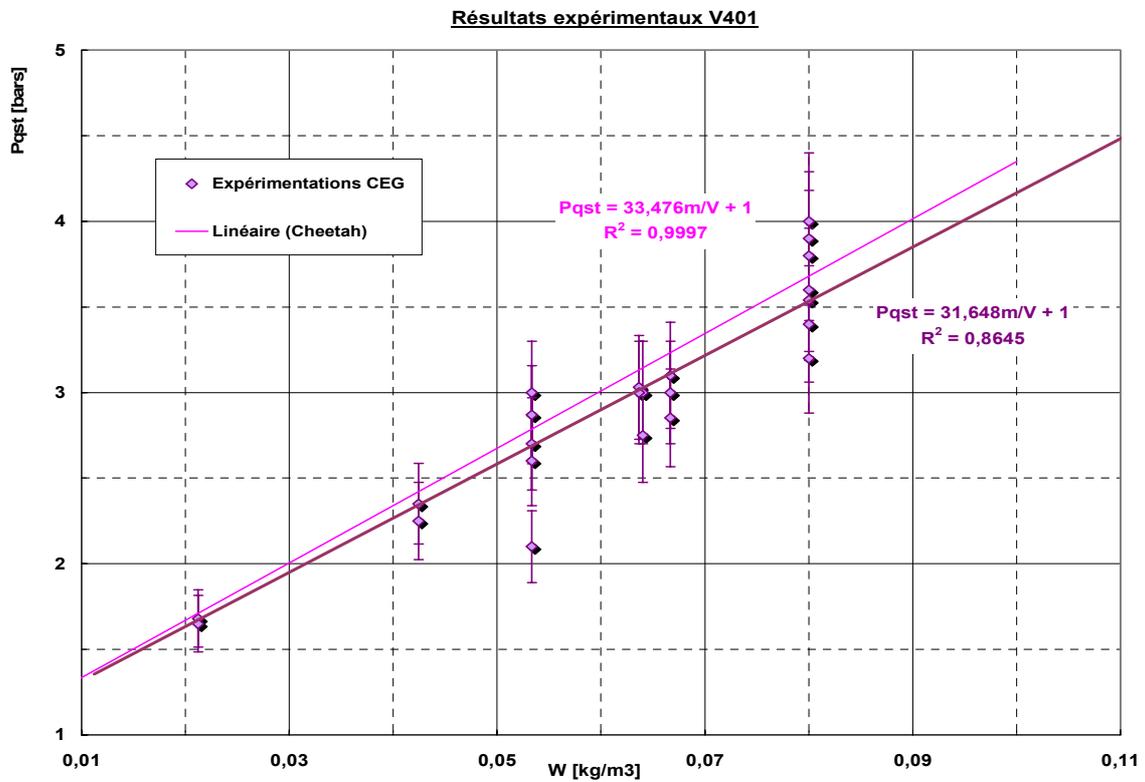


Figure II.30 Comparaison Expérience/Calculs pour la Surpression quasi-statique, en fonction du w pour le V401

b. Détermination de T_{qst} par traitement des signaux de P

La détermination de la température dans l'enceinte après explosion de la charge et combustion secondaire des produits de détonation est essentielle, afin de déterminer dans quel environnement peuvent se trouver injectés les produits chimiques stockés. Comme nous l'avons déjà écrit et justifié, cette estimation se fait de manière indirecte à partir des signaux de pression, selon le protocole de dépouillement par analyse spectrale détaillé en annexe B, dont on rappelle brièvement ici l'esprit :

- On sélectionne la portion de courbe correspondant au plateau de pression quasi-statique, pour lequel les oscillations de pression autour de P_{qst} sont faibles (amplitude inférieure à 10% de P_{qst}),
- Une analyse de Fourier pratiquée sur cette zone donne pour chaque expérimentation un spectre de puissance normalisé comme celui-ci :

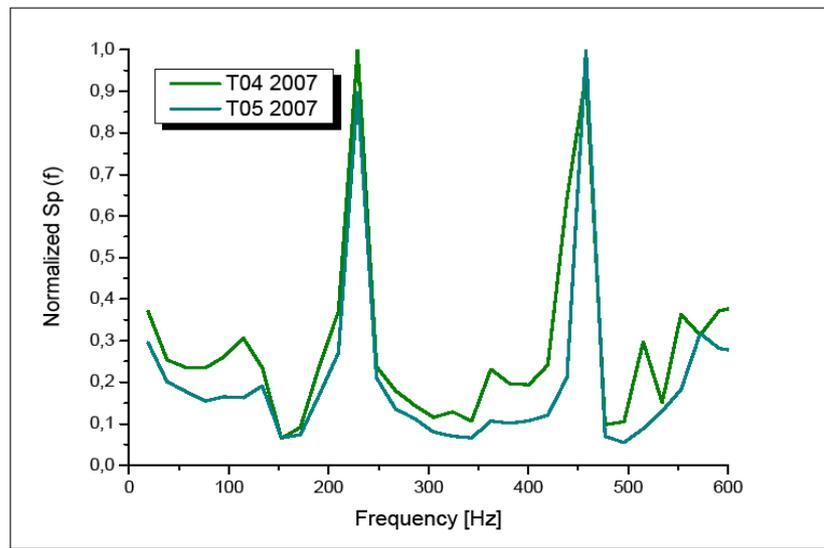


Figure II.31 Spectre fréquentiel obtenu par transformée de Fourier du signal de pression – comparaison du résultat pour deux tirs « bunker » identiques (deux types de capteur différents)

- On relève alors les fréquences f_i caractéristiques qui sont au nombre de 2 ou 3 selon la configuration d'essai.

Ces fréquences sont directement liées à la vitesse de propagation des ondes de surpression dans le milieu, porté à P_{qst} (homogène sur le volume V) et à température élevée (non homogène sur V). Fréquences f et célérités des ondes sont reliées par les dimensions du volume clos. On obtient au final plusieurs vitesses de propagation mesurée c_{mes} .

Dès lors, on utilise la relation suivante, dans l'approximation des gaz parfaits (valable pour décrire l'état quasi-statique) reliant c à T :

$$c_{mes} = \sqrt{\gamma r T_{mes}}$$

Avec γ le coefficient polytropique pris égal à 1,4, et r étant égal à la constante des gaz parfaits R divisée par la masse molaire du mélange, calculée par un code thermochimique. La valeur de r peut faire l'objet de correction si on dispose d'indications précises sur la composition des gaz à l'issue du processus de combustion secondaire.

On en déduit directement une estimation de la température du mélange gazeux : il s'agit bien évidemment, selon la position du capteur par rapport à la zone de développement des produits de détonation, d'une valeur indicative car elle contient l'ensemble des « informations » enregistrées par l'onde acoustique le long de son parcours. Sur une expérimentation, on obtient autant de valeur de T_{mes} que de fréquences caractéristiques relevées : ces valeurs de T_{mes} sont distinctes car elles correspondent à des parcours des ondes différents.

Par exemple, pour les tirs « bunker », on relève en général deux fréquences : la fréquence basse correspond à la propagation des ondes sur L , la longueur de l'enceinte, la fréquence haute correspond à la propagation des ondes sur l , la profondeur du bunker. Une troisième fréquence relative à la hauteur h du volume est potentiellement détectable et est la plus élevée des trois car $h < l < L$.

La figure II.31 permet d'illustrer le caractère reproductible de ce type de dépouillement. L'analyse spectrale conserve la reproductibilité des mesures originelles. On note toutefois une variation de la largeur des pics selon le type de capteur, ou bien encore une aptitude plus marquée des capteurs piézoélectriques à capturer des fréquences hautes.

Pour valider ce constat, il est utile de visualiser en temps réel les effets de l'explosion interne. Les enregistrements VNUR de l'explosion interne sont utiles pour comprendre la dynamique des produits de détonation et interpréter les résultats des mesures. La figure II.32 est une extraction des séquences d'enregistrement d'un tir bunker (avec une masse de TNT de 150 g, placée au centre du volume). La caméra numérique « couleur » visualise au travers d'un hublot latéral un sous volume proche d'un mur, à une cadence de 30000 i/s. Les différences entre les deux extractions sont le temps de pose des caméras et le grossissement. Les images de droite montrent plus clairement la position limite des DP alors que les images de gauche permettent de visualiser la propagation du choc réfléchi qui réactive la combustion.

On visualise en effet nettement par cette vue de côté le développement de la boule de feu dans le bunker, entre $t_0 + 1,5$ ms (image 1) et $t_0 + 4$ ms (image 5), t_0 correspondant à la détonation de la charge explosive. Dans le bunker, l'expansion des gaz chauds est accentuée dans le sens de la plus grande longueur. A gauche, la deuxième et la troisième image montre le choc réfléchi, visible au niveau des parties lumineuses. Au final, les produits chauds sont maintenus à distance des parois au centre du volume. Les gaz chauds ont également tendance, lorsque l'enceinte présente de grandes dimensions, à suivre un courant ascendant.



Figure II.32 Extractions des enregistrements vidéo numériques rapides lors de tirs bunker

Pour aller plus loin, on construit le schéma ci-dessous qui permet d'illustrer les effets d'aller-retour d'ondes dans le volume :

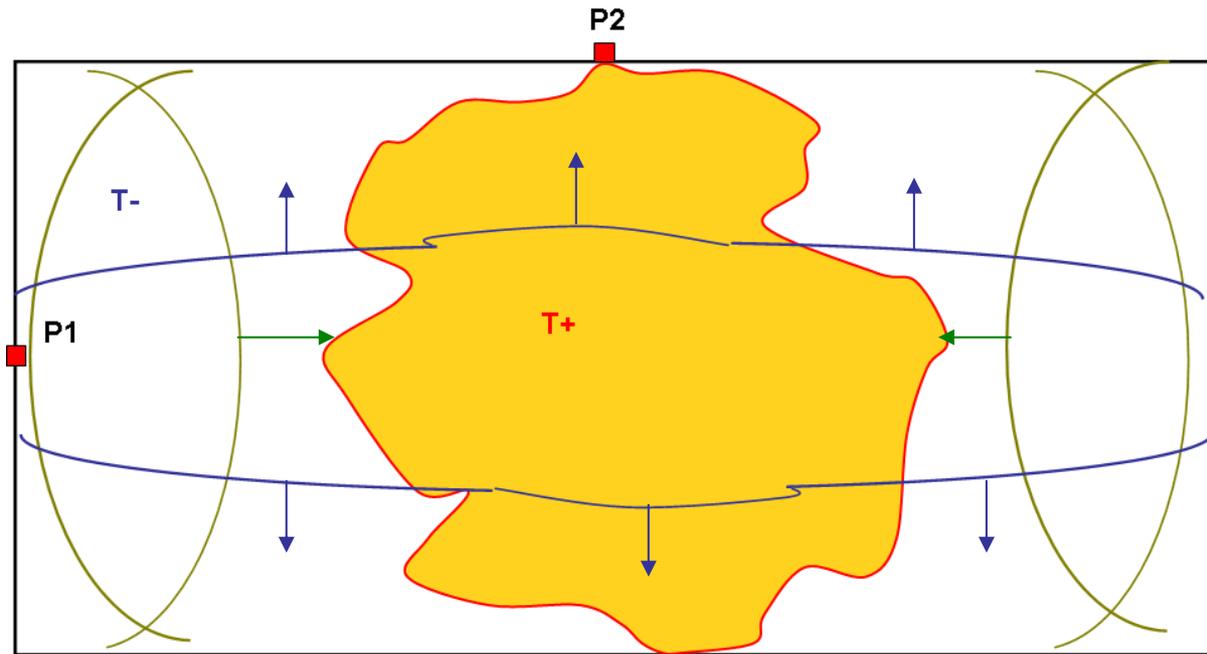


Figure II.33 Schéma de propagation des ondes quasi-acoustiques dans le bunker

Le volume de gaz chauds se maintient donc au centre du volume et peut occuper selon W plus de la moitié de V . P1 et P2 sont deux points de mesure possibles de la surpression interne. P1 reste au sein des gaz comprimés mais non mélangés aux DP, dénommés zone « froide ». P2 se trouve au contraire en contact avec les gaz en réaction de la zone « chaude ». On considère ici que la température est homogène dans la zone chaude (et égale à T_+) et dans la zone froide (égale à T_-), ce qui n'est évidemment pas le cas en réalité. Les enregistrements de pression en P1 et P2 ont des parties continues similaires (obtenues après filtrage, les signaux étant recalés par rapport aux temps d'arrivée du premier choc), mais ont des variations dynamiques dues aux réflexions des ondes de choc a priori différentes. Les ondes capturées par P1 sont de deux ordres (en 2D) :

- des trains d'ondes parcourent L en traversant une zone à T_+ et deux zones à T_- (par symétrie, si la charge explosive est située au centre du volume). Ces ondes sont au niveau de P1 des ondes réfléchies.
- Le capteur enregistre également des variations locales de P dues aux trains d'ondes se propageant suivant l , et qui sont défilantes par rapport à la paroi.

P2 se trouve dans une situation exactement symétrique. En toute rigueur, les propagations des ondes sont dans la réalité influencées par la troisième dimension et par l'évolution globale du système dans le temps et dans l'espace. La température T_{mes} déduite de la fréquence haute (correspondant à l) est inférieure à T_{mes} déduite de la fréquence basse (correspondant à L), que l'on appelle T_{moy} par la suite. On a dans ce cas l'inégalité suivante :

$$T_- < T_{moy} < T_+$$

Si on précise notre propos, T_- est la température de l'air n'ayant pas participé aux réactions de combustion mais ayant été chauffé par compression et par le rayonnement des DP. T_+ est la température des produits de la combustion (supposée totale) des DP et de l'azote de l'air ayant

participé à la réaction, si l'on considère les réactions de combustion comme instantanées. En toute rigueur, la zone chaude contient également des produits gazeux imbrûlés.

On peut alors définir trois constantes des gaz parfaits réduites :

$$r_+ = \frac{R}{M_{mel}}, \quad r_- = \frac{R}{M_{air}} \quad \text{et} \quad r = \frac{R}{M_{th}} \quad \text{où } M_{mel} \text{ est la masse molaire des produits de combustion}$$

(incluant l'azote impliqué) et M_{th} la masse molaire de l'état final calculé avec le module d'explosion à volume constant de Cheetah. Ces trois valeurs correspondent alors à trois vitesses du son c_+ , c_- , et c_{moy} . Pour une charge de 100g de TNT (de masse molaire 227,13 g/mol) dans un volume de 1,875 m³, ces masses molaires prennent des valeurs respectives de 36,27.10⁻³, 29.10⁻³ et 30,04.10⁻³ kg/mol.

Avec un nombre de capteurs de pression suffisant et en utilisant les contraintes reliant les dimensions du volume V et ces vitesses du son, il est possible d'estimer les dimensions caractéristiques (NB : en toute rigueur une moyenne de ces dimensions sur l'intervalle de temps de l'analyse spectrale) des zones chaudes et froides à l'intérieur du volume. Cette analyse n'a pas été tentée ici car elle nécessite un nombre de capteurs importants afin de discrétiser au maximum le volume total, et un traitement couplé affiné des signaux pseudo-acoustiques enregistrés.

Au final, il est possible de tracer les figures II.34 à II.40, qui indiquent pour chaque chambre de tir, les valeurs de T_{mes} relatives à la fréquence haute et à la fréquence basse selon le taux de chargement en explosif. On compare ces valeurs à la température théorique calculée à l'aide de Cheetah 2.0, code qui nous a servi de référence jusqu'à présent.

Les barres d'erreur affichées correspondent à la limite de résolution de la méthode de dépouillement et à la transmission de l'erreur aux travers des différentes étapes de calcul. La résolution est directement liée à la largeur à mi hauteur des pics du spectre calculé. La température calculée étant directement proportionnelle à la vitesse du son au carré, l'erreur de mesure sur cette dernière peut induire une erreur double sur la température. L'ensemble des résultats expérimentaux est répertorié dans le tableau II.5.

Sur chaque graphique sont représentées les courbes théoriques de la température quasi-statique homogène atteinte dans le volume V. En violet foncé est tracée la courbe de la température théorique en fonction du taux de chargement W en TNT. En violet clair, il s'agit de la courbe relative au V401. On ne considère ici que l'intervalle [0 ; 0.12] kg/m³ pour W. Sur cet intervalle, T_{qst} théorique affiche une tendance logarithmique. On se limite à cet intervalle pour deux raisons : les résultats probants sont nombreux sur cet intervalle, pour les trois chambres de tir. Pour des valeurs de W plus élevées, l'analyse se heurte à une forte dispersion des valeurs de T après traitement des signaux pour un échantillon de taille plus faible. On explique en partie cet état de fait par la dérive thermique de plus grande ampleur des capteurs de pression face aux variations de température pour les taux de chargement élevés.

On a également tracé sur chaque graphique la courbe d'interpolation (polynômiale) des résultats expérimentaux à titre indicatif afin de mettre en évidence la tendance de variation de la température mesurée en fonction de W.

Pour comprendre les résultats, il faut garder à l'esprit que les valeurs de température mesurées par analyse spectrale sont issues d'une double opération d'« intégration » dans l'espace et dans le temps : les fréquences contiennent en effet les informations relatives au parcours des ondes sur

une distance donnée, et sont calculées pour un intervalle de temps donné (portion de courbe correspondant au plateau de pression quasi-statique). Sur cet intervalle de temps, des échanges d'énergie notamment par rayonnement se sont déroulés à l'intérieur de la phase gazeuse.

Les courbes obtenues amènent les remarques suivantes :

- Figure II.34 : Ce graphique présente les températures T_{moy} (avec l'hypothèse d'un mélange de composition homogène) déduites de la fréquence basse, sur l'ensemble des expérimentations DMC mettant en œuvre du TNT. Pour $W < 0.04 \text{ kg/m}^3$, les températures obtenues sont proches de T_{qst} , voire légèrement supérieures, dans l'intervalle d'erreur de la mesure. La dispersion des résultats est par ailleurs assez large sur l'ensemble des données. On met toutefois en évidence un comportement quadratique de T_{moy} par rapport à W . Plus le taux de chargement augmente, plus l'écart relatif entre T_{moy} et T_{qst} est important. Pour $W = 0,13 \text{ kg/m}^3$, cet écart atteint 30 %. On retiendra de ce premier graphique que la température T_{moy} est inférieure à T_{qst} . Il existe donc des zones froides de température T - encore inférieure.
- Figure II.35 : il s'agit de résultats analogues pour le V401, à nouveau quelle que soit la forme de la chambre de détonation. La dispersion des résultats est faible. On constate également un comportement quadratique de T_{moy} selon W . La courbe obtenue est proche de la courbe théorique calculée par Cheetah. L'écart entre les deux valeurs n'excède pas 9%.

On déduit de ces deux premiers graphiques, et notamment de la dispersion des résultats, que la transformation par combustion des DP du TNT est, de manière plus marquée, sensible à la configuration géométrique initiale de V . Le processus de combustion, ou plus précisément de déplacement des équilibres de réactions, est sensible aux variations locales de température et de pression, induites par les zones anguleuses de recirculation. La composition fortement chargée en particules et chaînes carbonées des DP du TNT accentue cette sensibilité.

On retiendra ici que T_{moy} peut s'écrire sous la forme d'un polynôme du second degré en W , pour le TNT et le V401, sur l'intervalle $[0,01 - 0,13]$:

$$T_{\text{moy}} = aW^2 + bW + c$$

Avec $a_{\text{TNT}} = -67244 \text{ K}(\text{m}^3/\text{kg})^2$, $b_{\text{TNT}} = 17310 \text{ K m}^3/\text{kg}$, $c_{\text{TNT}} = 300 \text{ K}$ et $a_{\text{V401}} = -17281 \text{ K}(\text{m}^3/\text{kg})^2$, $b_{\text{V401}} = 9830 \text{ K m}^3/\text{kg}$, $c_{\text{V401}} = 300\text{K}$.

La figure II.36 montre le réseau de courbes obtenues si l'on compare sur le même intervalle ces deux polynômes avec les courbes théoriques données par Cheetah. Ce premier niveau d'analyse des informations contenues dans le spectre des signaux de pression ainsi que la description simplifiée de propagation des ondes permettent de comprendre les figures suivantes.

Sur la figure II.37, on donne les températures déduites de la fréquence haute, mesurée lors des tirs « bunker », pour une charge de TNT ou de V401. Les capteurs de pression se trouvent systématiquement dans la zone froide. On constate que les températures sont similaires à W fixé pour les deux explosifs. Quelle que soit la nature de la charge, le protocole expérimental ne permet pas de différencier la température de cette zone. A même masse d'explosif, la surpression quasi-statique engendrée par le TNT est supérieure à celle engendrée par le V401 mais la combustion secondaire du V401 implique un nombre de moles d'air moindre. De plus, on constate que, quelle que soit la valeur de W sur l'intervalle d'étude, l'écart entre T_{moy} et T est plus marqué pour le TNT

que pour le V401. Là encore, le caractère sous-oxygéné des produits de détonation accentue le caractère non homogène du champ de température.

On observe maintenant plus en détail les résultats de l'analyse de la fréquence haute pour les trois chambres hermétiques, au sein desquelles nous avons fait détoner du TNT. Sur la figure II.38 en effet, plusieurs différences notables apparaissent selon que l'explosion ait eu lieu dans la chambre Athéna (cylindrique, avec multiples renforts intérieurs), Sirocco (cylindrique) ou le bunker :

- Les températures déduites de la fréquence haute (donc relative au diamètre du volume cylindrique) sont pour la chambre Sirocco nettement au dessus de la courbe donnée par Cheetah. Ceci s'explique aisément par le fait que le capteur de pression se trouve sur la paroi latérale à proximité de la chambre. On est ici dans un cas symétrique à celui du bunker : le capteur se situe tout au long de l'enregistrement dans la zone chaude, et la fréquence haute traduit le parcours des ondes au travers des produits de combustion.
- Par contre, les températures reliées à la fréquence haute lors de tirs de TNT dans la chambre Athéna, d'allongement supérieur à celui de la chambre Sirocco, sont très nettement en dessous de la courbe donnée par Cheetah. Le capteur de pression analysé se situe sur une tige de fermeture, et est a priori dans la zone dite froide. De par la présence de nombreux renforts internes, la largeur du pic de fréquence haute est importante, car il y a de nombreuses possibilités de réflexions des ondes à l'intérieur du volume, tout comme il existe deux longueurs caractéristiques du volume.

Ces constats prouvent là encore le caractère hétérogène du champ de température interne, ainsi que l'influence pour un explosif donné à un taux de chargement donné de la géométrie de la salle, et de la position relative de la charge explosive par rapport aux parois.

Pour finir cette analyse spectrale, et afin d'illustrer les limites d'une telle méthode, on revient figure II.39 sur les résultats des tirs bunker avec du V401 faiblement sous-oxygéné. On se focalise ici sur l'intervalle $[0.04 - 0.09]$ kg/m³. Comme nous l'avons déjà écrit, l'écart entre les deux températures est faible pour cet explosif. On remarque de plus que les gammes de résultats se chevauchent.

Nous avons par ailleurs constaté visuellement que la durée de réaction est globalement plus courte pour le V401 que pour le TNT (pour une même masse d'explosif).

On déduit de ces dernières remarques, ainsi que du reste de l'analyse que la méthode employée, à défaut de disposer de moyens de mesure de la température performants, permet uniquement de différencier les effets thermiques induits par des explosifs ayant des B.O très éloignées. Le caractère hétérogène du champ de température est démontré mais non quantifiable pour un explosif faiblement sous oxygéné. Sur l'intervalle de temps utilisé pour la transformation de Fourier, l'homogénéisation de température est plus efficace pour ce type d'explosif. Inversement, les explosifs comme le TNT (B.O très négative) sont sensibles aux particularités géométriques du domaine : les réactions de combustion plus complexes peuvent localement être atténuées ou accentuées.

Outre l'évolution polynomiale de la température moyenne, on retiendra pour la suite que, sur l'intervalle d'étude [0.01 – 0.13] kg/m³ :

Pour le TNT,

- la température moyenne du milieu est comprise entre 450 et 1450 K selon la valeur de W .
- la température dans la zone chaude est, sur l'intervalle de temps utilisé pour l'analyse spectrale, supérieure à cette dernière.
- La température de la zone froide est comprise entre 400 et 1300 K selon la valeur de W .

Pour le V401,

- la gamme de température est du même ordre [400, 1300] K. Les résultats obtenus ne permettent pas de mettre en évidence des différences de température importantes entre les différentes zones.
- On peut toutefois tracer la figure II.40, courbe représentant l'écart entre la température moyenne des essais TNT (courbe bleu foncé) et la température moyenne des essais V401 (courbe bleu clair). Si les plages de température sont voisines (valeurs extrêmes des écarts inférieures à 5%), on s'aperçoit que cet écart est supérieur à 30% pour des valeurs de W comprises entre 0.025 et 0.075 kg/m³. A l'intérieur de l'intervalle [0.01 – 0.14] kg/m³, la température moyenne induite par l'explosion d'une charge de TNT reste supérieure à celle engendrée par le V401.

Pour des taux de chargement supérieurs, des investigations supplémentaires sont nécessaires (cf. Partie IV Conclusions et Perspectives).

De même, afin de quantifier les volumes des zones par cette méthode d'analyse, il est nécessaire d'augmenter le nombre de capteurs, et de déterminer la sensibilité de la mesure par rapport à la durée de l'échantillon du signal analysé. On obtiendrait ainsi un ensemble discret de spectres de fréquence $S_p = f(\Delta t, \Delta x, \Delta y, \Delta z)$.

Des expérimentations complémentaires ont également été effectuées en plaçant initialement la charge explosive en plusieurs points du volume de tir (et donc la position relative des capteurs de pressions). Ces expériences ont confirmé les tendances affichées et le caractère hétérogène du champ de température.

Analyse de la Fréquence Basse / L - Résultats Expérimentaux TNT

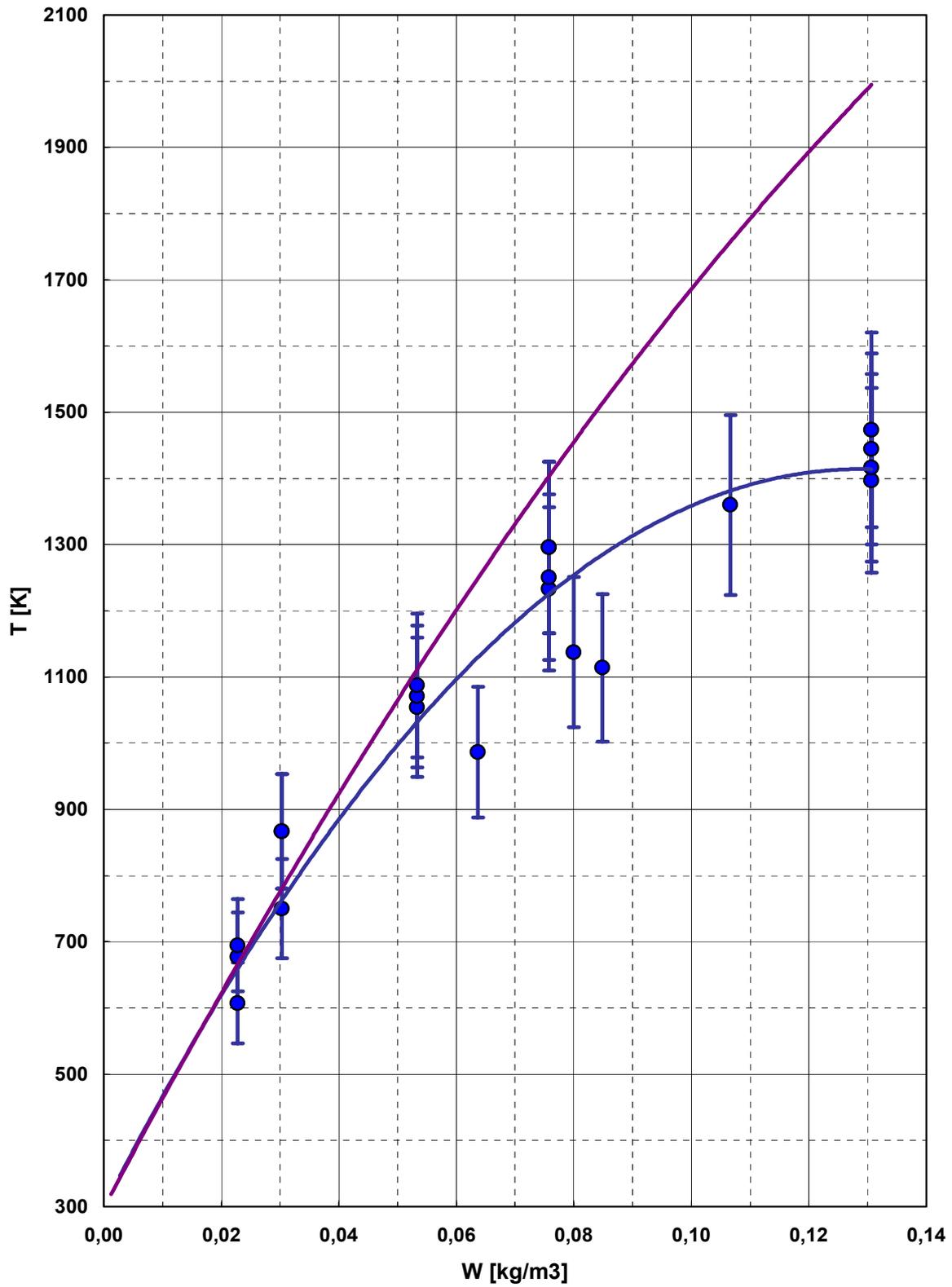


Figure II.34 Température déduite de l'analyse des fréquences basses relatives à la longueur maximale L du volume V pour le TNT

Analyse de la Fréquence Basse / L - Résultats Expérimentaux V401

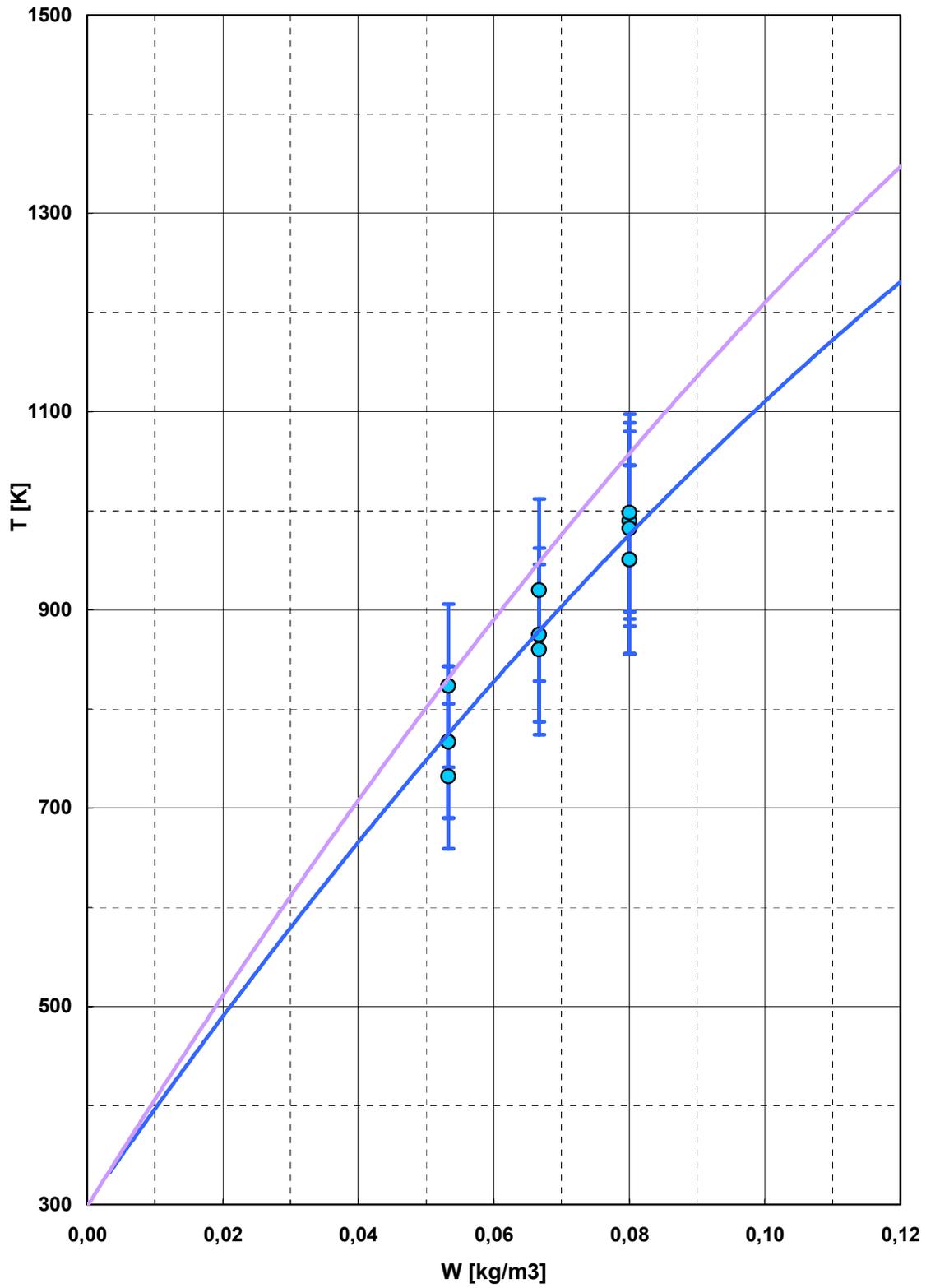


Figure II.35 Température déduite de l'analyse des fréquences basses relatives à la longueur maximale L du volume V pour le V401

Analyse de la Fréquence Basse / L

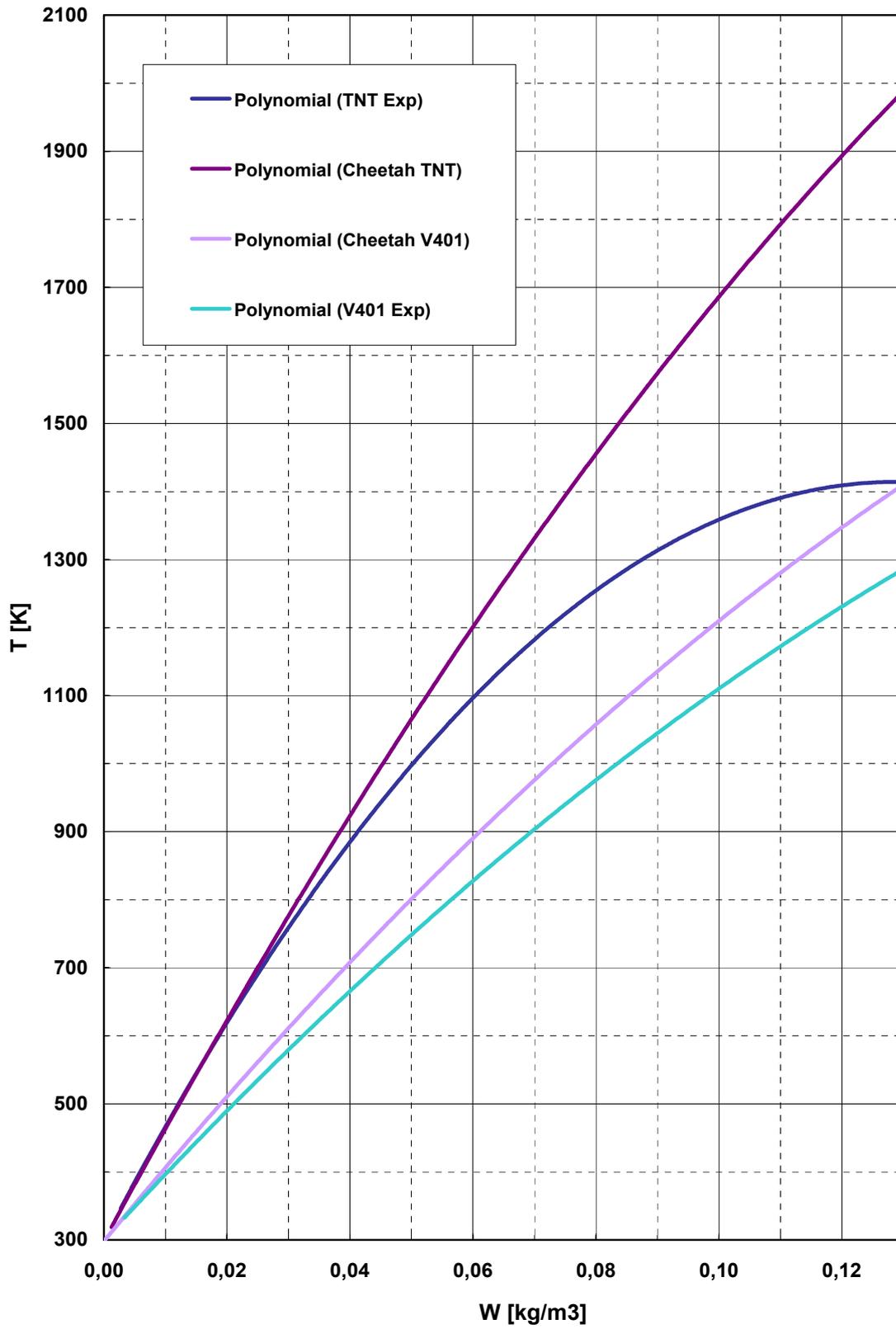


Figure II.36 Représentations polynômiales des températures déduites de l'analyse spectrale

Analyse de la Fréquence Haute / Bunker V401 et TNT

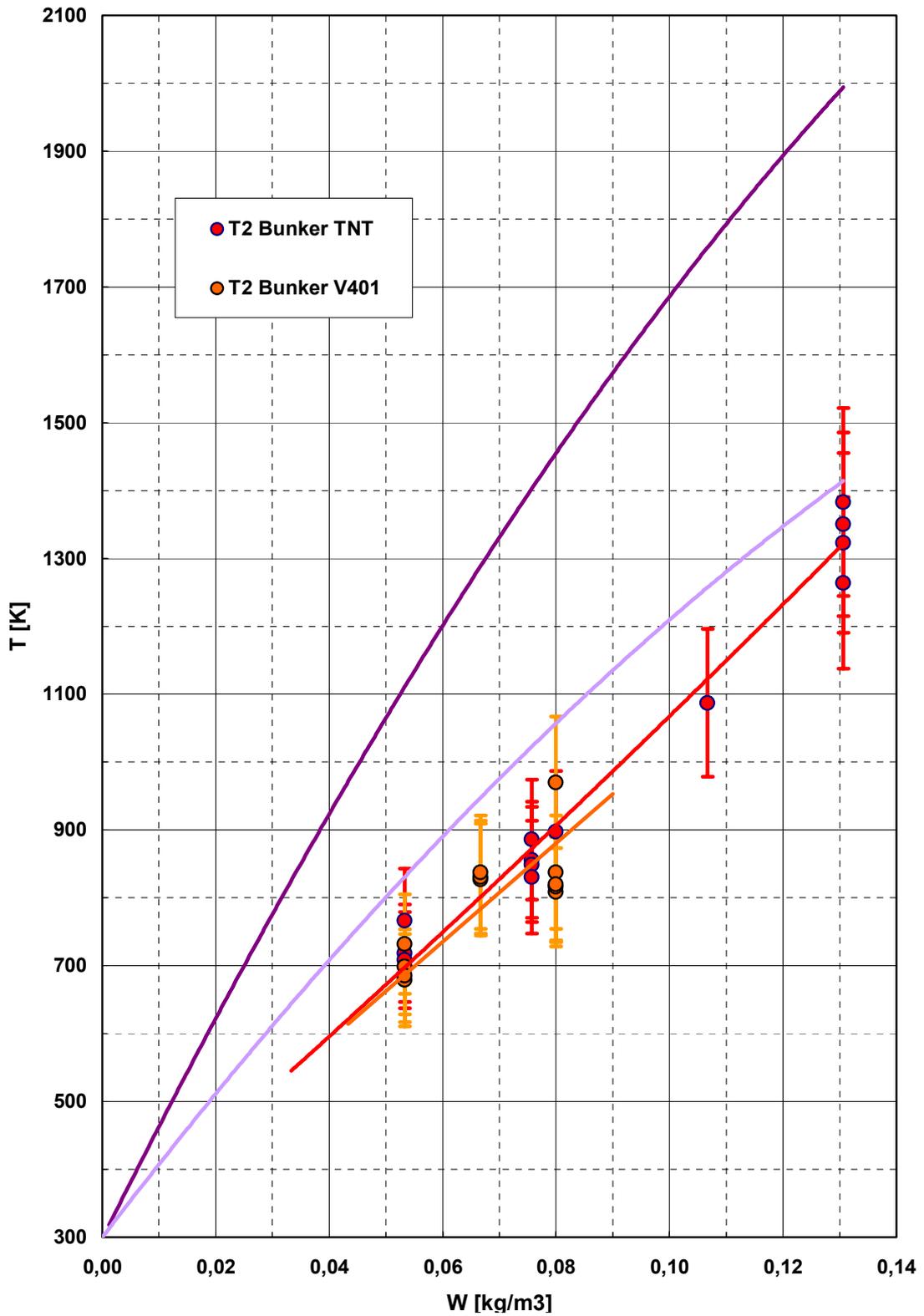


Figure II.37 Température déduite de l'analyse de la fréquence haute relative à la profondeur l du bunker, pour le TNT et le V401

Analyse de la Fréquence Haute - Résultats Expérimentaux TNT

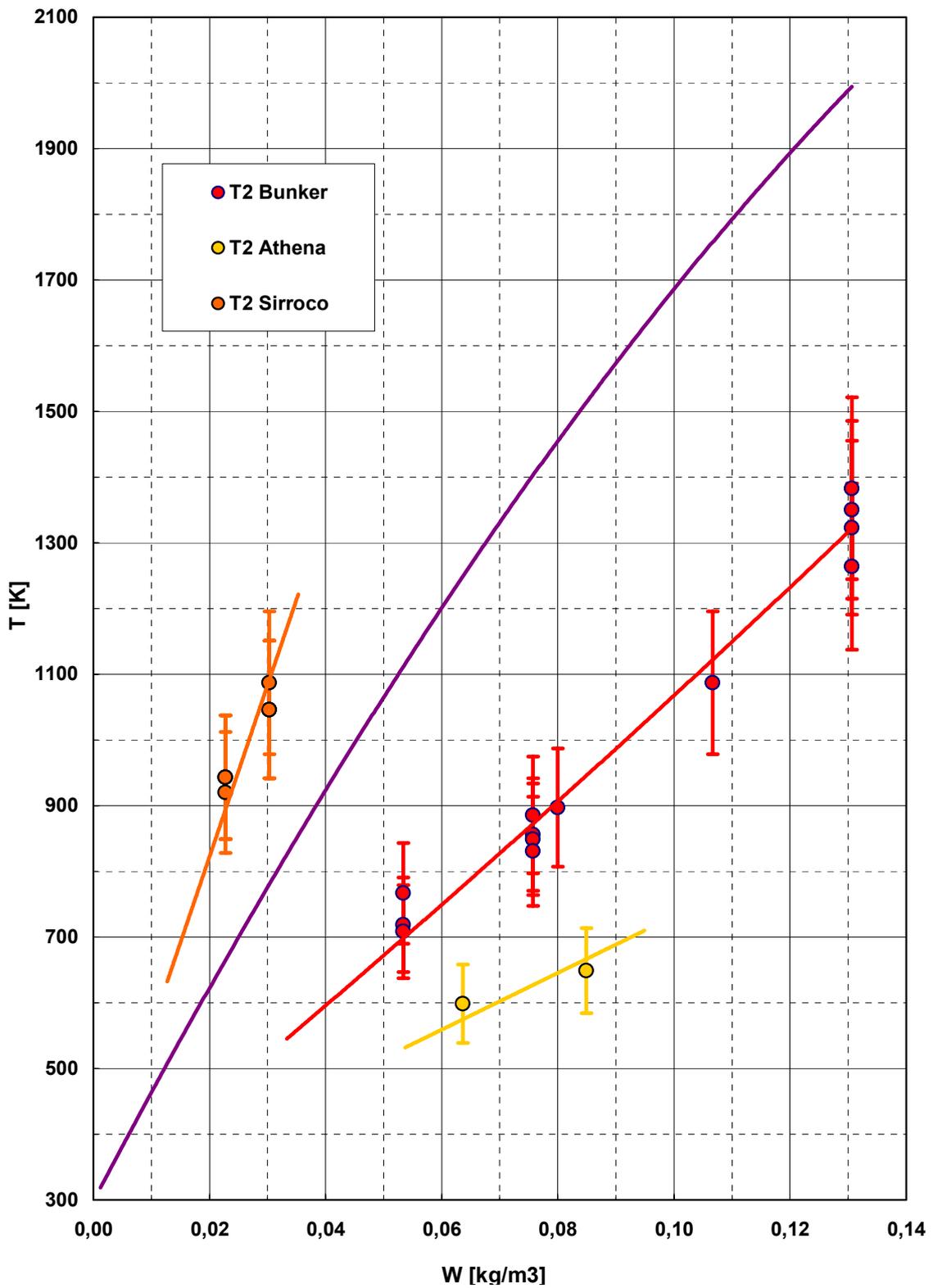


Figure II.38 Température déduite de l'analyse des fréquences hautes relatives à la petite longueur l du volume V pour le TNT

Analyse des résultats Bunker V401

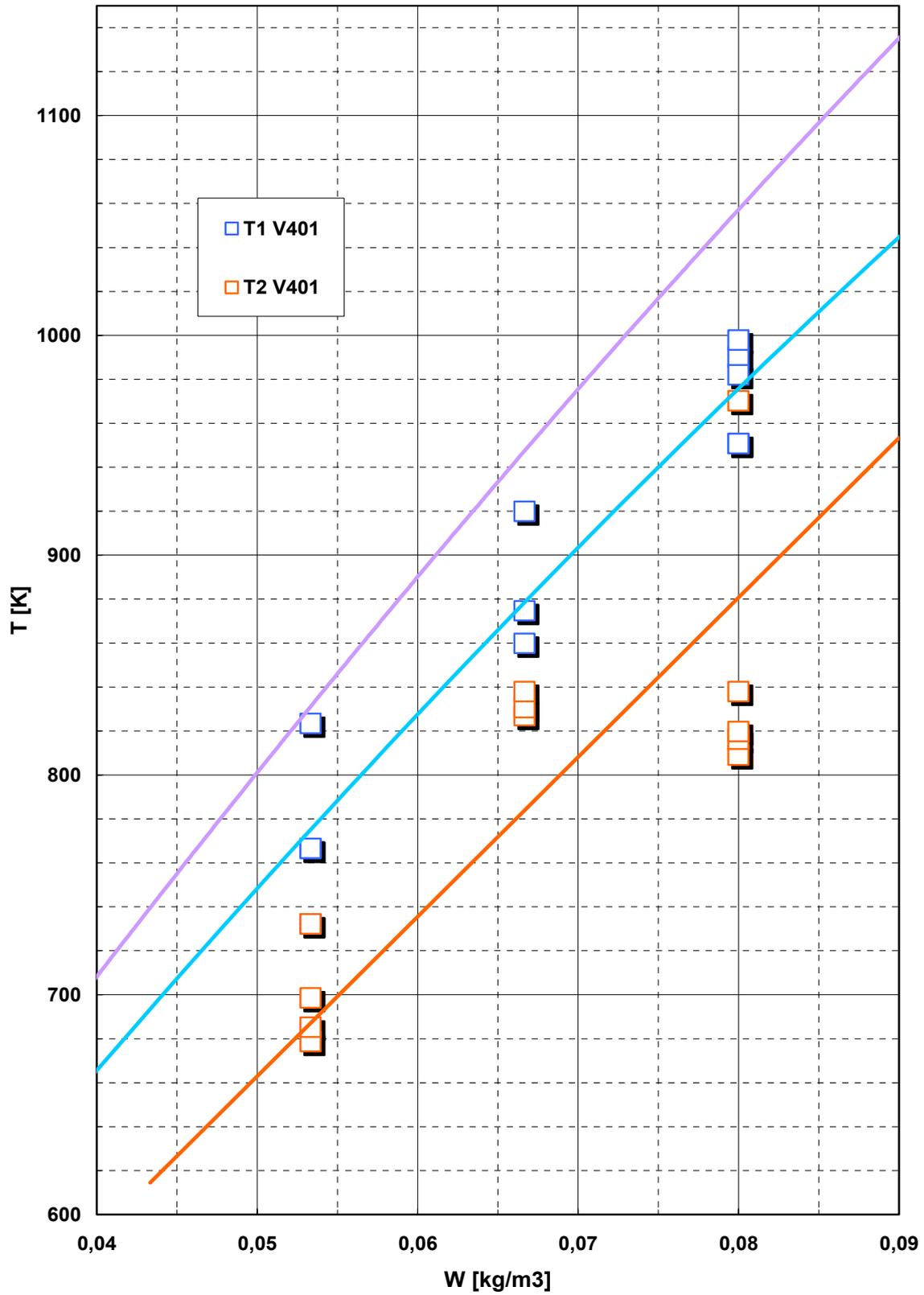


Figure II.39 Températures déduites des tirs bunker – cas du V401 : zoom sur l'intervalle [0,04 – 0,09]

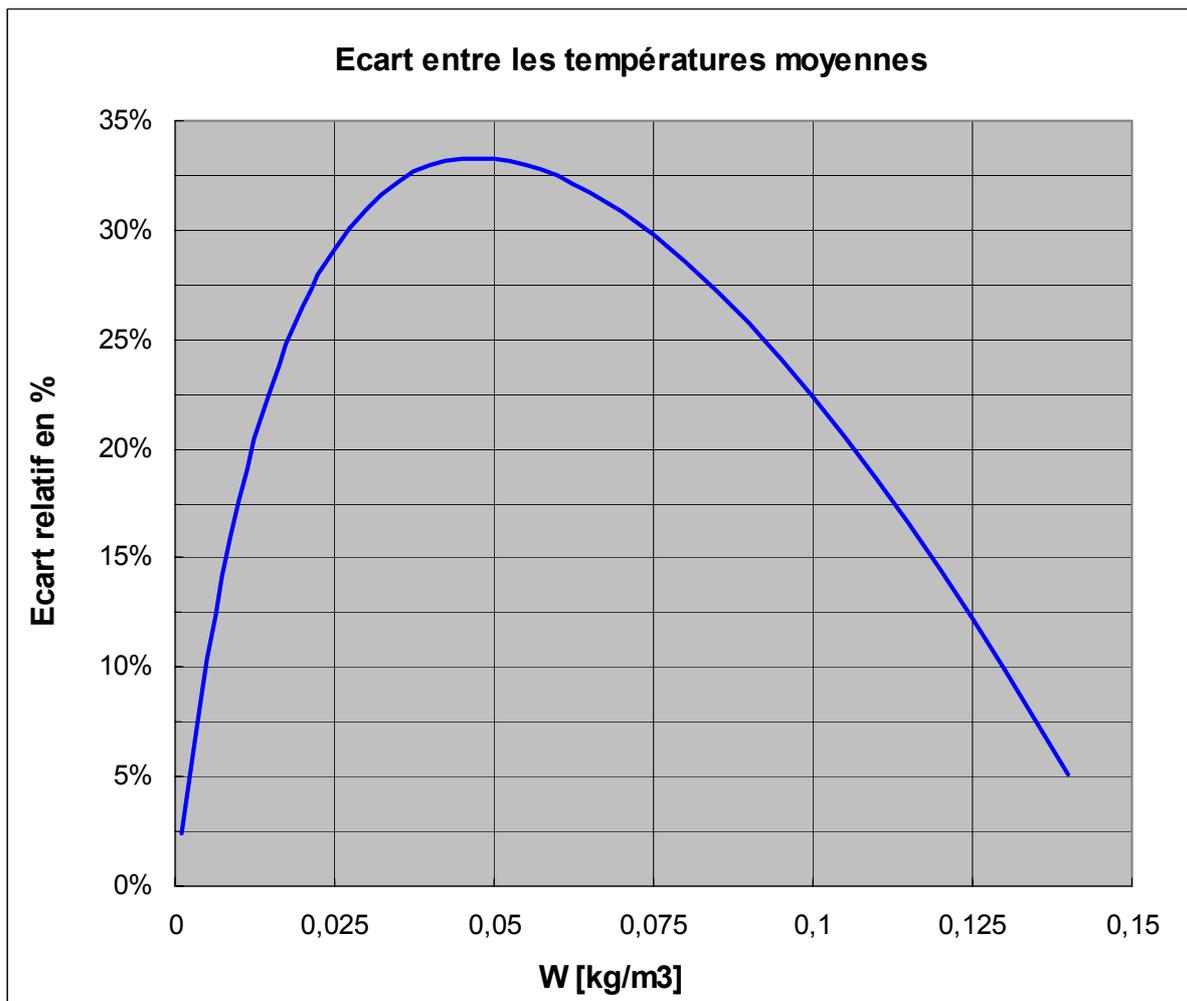


Figure II.40 Ecart relatif entre $T_{\text{moy}} \text{ TNT}$ et $T_{\text{moy}} \text{ V401}$ selon la valeur de W

Recensement des fréquences caractéristiques selon le taux de chargement pour les 3 enceintes

Tir	Explosif	W [kg/m3]	F1 [Hz]	F2 [Hz]	a1[m/s]	a2[m/s]	a1/a0	a2/a0	T1[K]	T2[K]	T qst Cheetah TNT [K]
B	V401	0,053	228	430	570	537,5	1,662	1,567	823,37	732,16	1111,10
B	V401	0,067	233	457	582,5	571,25	1,698	1,665	859,88	826,99	1288,35
B	V401	0,067	235	458	587,5	572,5	1,713	1,669	874,71	830,61	1288,35
B	V401	0,067	241	460	602,5	575	1,757	1,676	919,94	837,88	1288,35
B	V401	0,080	245	495	612,5	618,75	1,786	1,804	950,73	970,24	1455,21
B	TNT	0,080	268	476	670	595	1,953	1,735	1137,62	897,18	1455,21
B	TNT	0,107	293	524	732,5	655	2,136	1,910	1359,76	1087,25	1757,75
B	TNT	0,076	286	465	715	581,25	2,085	1,695	1295,56	856,19	1402,95
B	TNT	0,076	279	463	697,5	578,75	2,034	1,687	1232,92	848,85	1402,95
B	TNT	0,076	286	458	715	572,5	2,085	1,669	1295,56	830,61	1402,95
B	TNT	0,076	281	473	702,5	591,25	2,048	1,724	1250,66	885,91	1402,95
B	TNT	0,131	297	578	742,5	722,5	2,165	2,106	1397,14	1322,89	1994,48
B	TNT	0,131	302	584	755	730	2,201	2,128	1444,58	1350,49	1994,48
B	TNT	0,131	299	591	747,5	738,75	2,179	2,154	1416,02	1383,06	1994,48
B	TNT	0,131	305	565	762,5	706,25	2,223	2,059	1473,42	1264,05	1994,48
B	TNT	0,053	258	426	645	532,5	1,880	1,552	1054,30	718,60	1111,10
B	TNT	0,053	260	423	650	528,75	1,895	1,542	1070,71	708,51	1111,10
B	TNT	0,053	262	440	655	550	1,910	1,603	1087,25	766,61	1111,10
B	V401	0,080	250	460	625	575	1,822	1,676	989,93	837,88	1455,21
B	V401	0,080	249	452	622,5	565	1,815	1,647	982,03	808,99	1455,21
B	V401	0,080	245	454	612,5	567,5	1,786	1,655	950,73	816,17	1455,21
B	V401	0,080	251	455	627,5	568,75	1,829	1,658	997,87	819,77	1455,21
B	V401	0,053	220	414	550	517,5	1,603	1,509	766,61	678,68	1111,10
B	V401	0,053	215	420	537,5	525	1,567	1,531	732,16	698,50	1111,10
B	V401	0,053	220	416	550	520	1,603	1,516	766,61	685,26	1111,10
A	TNT	0,064	208	486	624	486	1,819	1,417	986,77	598,58	1249,39
A	TNT	0,085	221	506	663	506	1,933	1,475	1113,97	648,85	1513,80
A	V401	0,021									641,56
A	V401	0,042									958,64
A	V401	0,064									1249,39
S	TNT	0,023	76	244	516,8	610	1,507	1,778	676,85	942,99	664,91
S	TNT	0,023	77	241	523,6	602,5	1,527	1,757	694,78	919,94	664,91
S	TNT	0,023	72	244	489,6	610	1,427	1,778	607,48	942,99	664,91
S	TNT	0,030	86	257	584,8	642,5	1,705	1,873	866,69	1046,15	780,46
S	TNT	0,030	86	262	584,8	655	1,705	1,910	866,69	1087,25	780,46
S	TNT	0,030	80	257	544	642,5	1,586	1,873	749,97	1046,15	780,46
Etat de référence		0							300	300	298,15

Tableau II.5 Récapitulatif des fréquences relevées par analyse de Fourier des signaux de P et des températures déduites pour les expérimentations en milieu clos, sans liquide.

Ces résultats, tant théoriques qu'expérimentaux, amènent les remarques suivantes :

- Les calculs Cheetah montrent que la température des produits de combustion à volume constant est significativement supérieure à celle de la flamme de combustion des produits de détonation avec l'air en configuration aérienne. On peut expliquer ce phénomène de deux façons. La première se base sur le fait que la combustion en configuration aérienne s'effectue à pression constante. Les capacités calorifiques des gaz à volume constant étant inférieures à celles à pression constante, une production identique d'énergie conduit à une température plus élevée pour une transformation à volume constant. Une seconde explication réside dans les différences d'équilibres thermochimiques obtenus entre les transformations à volume constant et à pression constante.
- Pour l'ensemble de nos expérimentations, l'air se trouve initialement en excès et la quantité d'oxygène présente peut permettre une oxydation totale des produits de détonation. Mais selon le rapport de la masse d'explosif sur le volume de la salle, le mélange final des produits de détonation avec l'air peut être un mélange riche ou pauvre en oxygène, la stoechiométrie séparant ces deux régimes de combustion. Ces deux régimes conduisent à des compositions différentes pour les produits de combustion, imposées par les équilibres thermochimiques en fonction de la pression et de la température. Lorsque l'oxygène de l'air n'est pas suffisant, des calculs peuvent être également réalisés. Du carbone libre subsistera pour un mélange pauvre en oxygène. La température et la pression de combustion finale atteintes pour les deux situations encadrent la température obtenue à l'équilibre thermochimique. Ceci est dû au fait que, dans le cas d'un mélange riche en oxygène, l'excès d'oxygène et d'azote agissent comme un diluant, absorbant une partie de l'énergie apportée par l'explosion. Dans le cas d'un mélange pauvre en oxygène, le processus est similaire avec le carbone et l'azote.

Ces quelques commentaires et idées sont exploités dans le chapitre suivant pour développer un modèle simplifié de l'état thermodynamique final, en considérant les gaz régis par une équation de type gaz parfait et l'énergie effectivement mesurée dans le calorimètre de combustion iso péricole.

II.2.2.2 Modélisations thermochimiques de l'état quasi-statique

A/ Modèle empirique

Dans ce paragraphe, on effectue une mise en équation du système thermodynamique étudié afin de prendre en compte d'une part le comportement non linéaire de la dépendance de P_{qst} envers W , d'autre part une description plus fine des bilans énergétiques en prenant en compte notamment les différentes espèces en présence et leurs capacités calorifiques à volume constant respectives, dépendant *a priori* de T .

Hypothèses :

L'état quasi-statique (P, T) final d'une explosion à volume constant peut être mis en équations, à l'aide de modèles empiriques ou calculé de manière théorique (ou idéale) à l'aide du code thermochimique CHEETAH déjà cité par ailleurs. Les paramètres des modèles empiriques sont le plus souvent calés sur les résultats fournis par ce type de code.

Mise en équations et résolution :

Ces modèles empiriques s'expriment en fonction de la densité de chargement, rapport de la masse initiale d'explosif $m_{ex,0}$ sur le volume de la salle V_{salle} . (à strictement parler, il faudrait utiliser $V_{salle} - m_{ex}/\rho_{ex}$, mais le volume occupé initialement par l'explosif est supposé négligeable devant le volume

de la salle). La forme mathématique de T_{qst} , P_{qst} et du volume massique sont les suivantes en première approximation :

$$\left. \begin{aligned} T_{QST} &= A_3 \cdot \left[\log_{10} \left(\frac{m_{\text{explo},0}}{V_{\text{salle}}} \right) \right]^3 + A_2 \cdot \left[\log_{10} \left(\frac{m_{\text{explo},0}}{V_{\text{salle}}} \right) \right]^2 + A_1 \cdot \log_{10} \left(\frac{m_{\text{explo},0}}{V_{\text{salle}}} \right) + A_0 \\ P_{QST} &= B_2 \cdot \left[\log_{10} \left(\frac{m_{\text{explo},0}}{V_{\text{salle}}} \right) \right]^2 + B_1 \cdot \log_{10} \left(\frac{m_{\text{explo},0}}{V_{\text{salle}}} \right) + B_0 \\ V_{\text{massique}} &= C_2 \cdot \left(\frac{m_{\text{explo},0}}{V_{\text{salle}}} \right)^2 + C_1 \cdot \left(\frac{m_{\text{explo},0}}{V_{\text{salle}}} \right) + C_0 \end{aligned} \right\}$$

On peut également modifier ce format pour ajouter un terme d'exposant « 3 » pour la pression :

$$P_{QST} = B_3 \cdot \left[\log_{10} \left(\frac{m_{\text{explo},0}}{V_{\text{salle}}} \right) \right]^3 + B_2 \cdot \left[\log_{10} \left(\frac{m_{\text{explo},0}}{V_{\text{salle}}} \right) \right]^2 + B_1 \cdot \log_{10} \left(\frac{m_{\text{explo},0}}{V_{\text{salle}}} \right) + B_0$$

en augmentant le nombre de calculs thermochimiques pour assurer un « calage » valide dans une plus large plage de densité de chargement (typiquement de $5 \cdot 10^{-3} \text{ kg/m}^3$ à 10^{-1} kg/m^3). De plus, le volume massique peut également s'exprimer analytiquement en fonction des densités ρ_i et masses m_i des constituants du mélange :

$$V_{\text{massique}} = \frac{\sum m_i / \rho_i}{\sum m_i}$$

Application :

La figure II.41 montre que cette formulation « polynomiale » est parfaitement capable de reproduire les résultats théoriques (exemple donné pour un explosif secondaire classique, autre que le TNT et le HMX) :

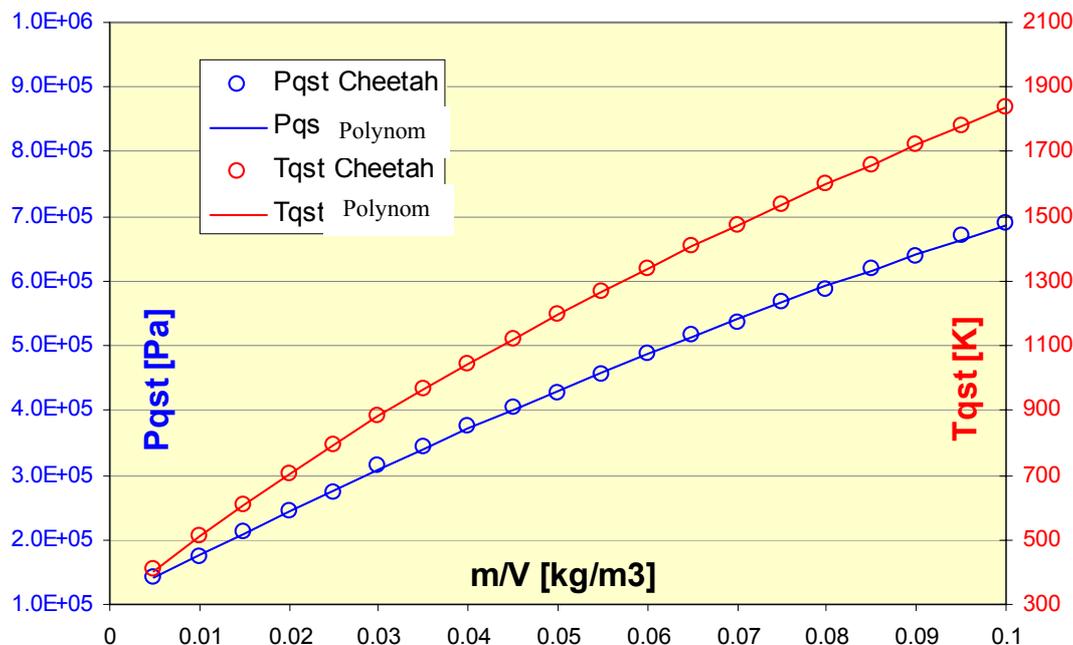


Figure II.41: Modélisation de PQST et TQST pour l'explosif B2214: Résultats Cheetah (symboles) et modèles empiriques modifiés (traits pleins)

Par contre, cette forme polynomiale conduirait rapidement à des aberrations lorsque l'on sort du domaine de calcul (forts taux de chargement). Enfin, comme indiqué précédemment, ce type de modélisation empirique requiert le pré-calcul d'une vingtaine d'états thermochimiques par CHEETAH, ou autre code équivalent, pour chaque explosif.

Pour s'affranchir de cette « dépendance », il est intéressant d'adopter une modélisation analytique intégrant une approche simplifiée de la thermochimie des phénomènes. Les paragraphes qui suivent décrivent une telle modélisation.

B/ Modèle de type « bilans énergétiques »

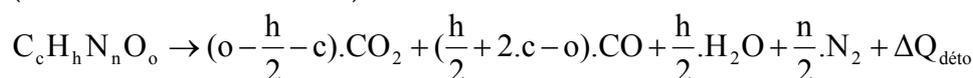
Hypothèses :

Le principe de calcul repose sur un bilan énergétique précis des phénomènes de détonation, de postcombustion, et d'échauffement des gaz n'ayant pas participé à ces réactions. Nous considérons que la quantité d'énergie libérée par un mélange aérobie stœchiométrique air + explosif sert à chauffer les produits de combustion, ainsi que l'air non consommé par les réactions de combustion, dans le volume total d'une salle supposée thermiquement isolée de l'extérieur (hypothèse adiabatique). Par ailleurs, ce mélange de gaz est supposé obéir à l'équation d'état des gaz parfaits.

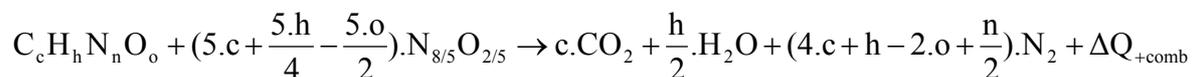
Les capacités calorifiques à volume constant des différents gaz en présence (supposés se limiter à N₂, O₂, CO₂, H₂O_{vap}) seront représentées par une fonction linéaire de la température. Si nécessaire, il est possible de raffiner le modèle en prenant en compte l'équilibre CO / CO₂ ou en prenant en compte une dépendance à la température plus complexe pour les capacités calorifiques.

Mise en équations et résolution :

La formule chimique brute des explosifs classiques (non aluminisés, non halogénés), peut se mettre sous la forme C_cH_hN_nO_o. Il est nécessaire de formuler une hypothèse sur la composition des DP, comme nous l'avons vu auparavant, pour élaborer un modèle général. Cette hypothèse peut être évidemment revue si on dispose de résultats expérimentaux. En choisissant comme produits de dégradation exclusifs CO, CO₂, N₂, H₂O vapeur, et en faisant l'hypothèse que CO₂ est le produit de dégradation privilégié du carbone, nous pouvons écrire l'équation bilan pour la réaction anaérobie (identifiable à la détonation) :



De même, en présence de l'oxygène de l'air (supposé en quantité suffisante, et dont la formule molaire brute est N_{8/5}O_{2/5}), la réaction bilan aérobie (assimilable à une détonation suivie de la postcombustion des produits sous-oxygénés) s'écrit :



Il faut remarquer dans cette équation que $\Delta Q_{+\text{comb}}$, exprimée par exemple en J.kg⁻¹, s'applique à la masse totale de réactif (explosif et fraction d'air impliquée dans la postcombustion) tandis que $\Delta Q_{\text{déto}}$ est ramenée uniquement à la masse d'explosif, contrairement aux notations habituellement retenues. Ces quantités de chaleur seront prises constantes. On choisit ici la notation ΔQ générique faisant référence à une chaleur dégagée, en lieu et place des notations ΔE et ΔH rencontrées par ailleurs.

La salle, initialement à P_0 et T_0 , contient un volume d'air égal à V_{salle} , auquel il faut en toute rigueur soustraire le volume occupé par l'explosif $V_{\text{explo}} = m_{\text{explo}}/\rho_{\text{explo}}$. (généralement négligeable devant V_{salle}). Ce volume d'air correspond à un nombre de moles égal à :

$$n_{\text{air},0} = \frac{P_0 \cdot (V_{\text{salle}} - V_{\text{explo}})}{R \cdot T_0}$$

Si l'on note M_{explo} la masse molaire de l'explosif, le nombre de moles d'explosif sera :

$$n_{\text{explo},0} = \frac{m_{\text{explo}}}{M_{\text{explo}}}, \text{ qui brûleront avec } n_{\text{air,comb}} = \left(5 \cdot c + \frac{5 \cdot h}{4} - \frac{5 \cdot o}{2}\right) \cdot n_{\text{explo},0} \text{ moles d'air.}$$

La masse d'air servant à la combustion sera notée $m_{\text{air,comb}}$. La composition molaire du mélange de gaz dans la salle après combustion totale (en supposant qu'il y a initialement suffisamment d'oxygène) s'exprime simplement par :

$$\left. \begin{aligned} n_{\text{CO}_2} &= c \cdot n_{\text{explo},0} \\ n_{\text{H}_2\text{O,vap}} &= h/2 \cdot n_{\text{explo},0} \\ n_{\text{N}_2} &= 4/5 \cdot n_{\text{air},0} + n/2 \cdot n_{\text{explo},0} \\ n_{\text{O}_2} &= 1/5 \cdot n_{\text{air},0} - (c + h/4 - o/2) \cdot n_{\text{explo},0} \\ n_{\text{gaz,total}} &= n_{\text{air},0} + (h/4 + n/2 + o/2) \cdot n_{\text{explo},0} \end{aligned} \right\}$$

Ces quantités pourraient aussi s'écrire, pour comparaison avec le modèle empirique précédent, en fonction de la densité de chargement $m_{\text{explo},0}/(V_{\text{salle}} - V_{\text{explosif}})$. L'énergie dégagée par la combustion sera $(m_{\text{explo},0} + m_{\text{air,comb}}) \cdot \Delta Q_{\text{+comb}}$. Cette énergie servira à chauffer le mélange de gaz présents dans la salle de la température initiale T_0 à la température quasi-statique T_{QST} supposée pour l'instant unique pour le mélange homogène des gaz. Les variations des capacités calorifiques $c_v(T)$ données dans la littérature sont approximées par une loi linéaire. Ceci est discutable pour CO_2 dans la plage 300 K - 1300 K, comme pour les autres gaz au-dessus de 2000 K. Il est également possible de retenir des lois polynômiales (de degré 4 ou 5). Les calculs s'en trouvent légèrement complexifiés. La précision supplémentaire apportée par ce type de loi est sensible en présence d'espèces plus nombreuses ou exotiques que l'on peut trouver dans certains matériaux énergétiques (fluor, chlore,...). La plage de validité en température est également plus grande. Les fonctions de lissage que nous retenons toutefois ici sont les suivantes, représentées sur la figure II.42 :

$$\left. \begin{aligned} \text{N}_2 \mapsto c_v[\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}] &= \mathbf{c}_{v,0}^{\text{N}_2} + \boldsymbol{\alpha}^{\text{N}_2} \cdot T = 665,28 + 0,19857 \cdot T \\ \text{O}_2 \mapsto c_v[\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}] &= \mathbf{c}_{v,0}^{\text{O}_2} + \boldsymbol{\alpha}^{\text{O}_2} \cdot T = 621,09 + 0,15138 \cdot T \\ \text{CO}_2 \mapsto c_v[\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}] &= \mathbf{c}_{v,0}^{\text{CO}_2} + \boldsymbol{\alpha}^{\text{CO}_2} \cdot T = 581,65 + 0,45080 \cdot T \\ \text{H}_2\text{O}_{(\text{vap})} \mapsto c_v[\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}] &= \mathbf{c}_{v,0}^{\text{H}_2\text{O}} + \boldsymbol{\alpha}^{\text{H}_2\text{O}} \cdot T = 1171,44 + 0,65292 \cdot T \end{aligned} \right\}$$

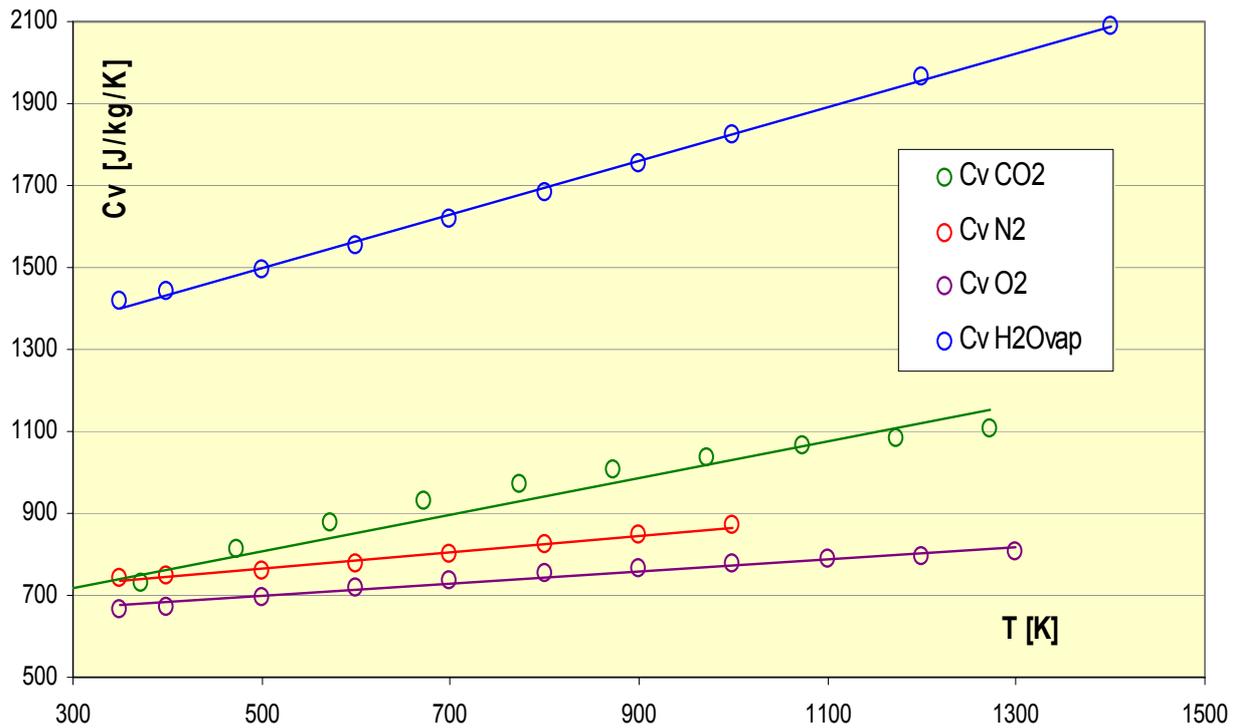


Figure II.42 Capacité calorifique à volume constant pour différents gaz : données de la littérature (symboles) et approximations linéaires (traits pleins)

Ces approximations linéaires permettent de calculer la capacité calorifique moyenne d'un mélange de gaz sous la même forme linéaire $c_v(T) = c_{v,0} + \alpha \cdot T$, et ainsi de résoudre le bilan d'énergie simplifié:

$$(m_{\text{explo},0} + m_{\text{air,comb}}) \cdot \Delta T_{\text{+comb}} = (m_{\text{explo},0} + m_{\text{air},0}) \cdot \int_{T_0}^{T_{\text{QST}}} [\bar{c}_{v,0} + \bar{\alpha} \cdot T] dT \text{ avec}$$

$$\left. \begin{aligned} (m_{\text{explo},0} + m_{\text{air},0}) \cdot \bar{c}_{v,0} &= \sum_{\text{espèces } i} m_i \cdot c_{v,0}^i \\ (m_{\text{explo},0} + m_{\text{air},0}) \cdot \bar{\alpha} &= \sum_{\text{espèces } i} m_i \cdot \alpha^i \end{aligned} \right\} \text{ qui s'exprime aussi en fonction des nombres de moles } n_i.$$

La résolution est celle d'une équation du second degré en T_{QST} , dont les coefficients sont :

$$\left. \begin{aligned} a_2 &= \frac{\bar{\alpha}}{2} \\ a_1 &= \bar{c}_{v,0} \\ a_0 &= - \left(\bar{c}_{v,0} \cdot T_0 + \frac{\bar{\alpha}}{2} \cdot T_0^2 + \Delta Q_{\text{comb}} \cdot \frac{m_{\text{explo},0} + m_{\text{air,comb}}}{m_{\text{explo},0} + m_{\text{air},0}} \right) \end{aligned} \right\}$$

Une fois T_{QST} obtenue, la pression quasi-statique sera recalculée simplement par :

$$P_{\text{QST}} = \frac{n_{\text{gaz,total}} \cdot R \cdot T_{\text{QST}}}{V_{\text{salle}}}$$

Application :

Pour commencer, on considère l'énergie massique de combustion comme une variable d'ajustement. On calcule, pour un explosif donné à différentes densités de chargement, l'état P_{QST} , T_{QST} à l'aide de CHEETAH, et cherche à chaque fois la valeur de ΔQ_{+comb} qui reproduit au mieux les résultats de ce code. Toutefois, suite aux résultats expérimentaux, obtenus et décrits par ailleurs dans ce mémoire, on fait le choix dans cette démarche d'analyse de reproduire au mieux les températures calculées par CHEETAH, et non les pressions, que le code thermo-chimique surestime, plus particulièrement pour les explosifs fortement sous-oxygénés comme le TNT. Ce choix est arbitraire mais permet également d'illustrer les limites de cette tentative de modélisation simplifiée. Le code Cheetah présente d'autres limitations (équation d'état des gaz notamment), mais il est pour l'instant notre seule référence, à défaut d'une capacité expérimentale de mesure précise des températures en espace clos et de discrimination du volume en zones dites « chaude » et « froide ». Les tableaux et figures reprennent dans les pages qui suivent, pour les deux explosifs étudiés (TNT, V401) et différentes densités de chargement :

- les valeurs de T_{QST} et P_{QST} trouvées par CHEETAH avec comme produits CO_2 , H_2O , N_2 , O_2 seuls,
- la valeur de ΔQ_{+comb} calée pour reproduire T_{QST} avec le modèle ci-dessus,
- la valeur de P_{QST} correspondante,
- la valeur optimale à adopter pour reproduire au mieux la température CHEETAH pour toute la gamme de densités de chargement étudiées (à l'exception de la masse maximale d'explosif, qui correspond à un cas limite pour lequel notre hypothèse de combustion totale possible en CO_2 , H_2O et N_2 n'est pas justifiable),
- les valeurs de T_{QST} et P_{QST} obtenues par notre modèle pour la valeur optimale de ΔQ_{+comb} .

M explosif [kg]	Tqst cheetah [K]	Pqst cheetah [bar]	Tqst Modèle [K]	Pqst modèle [bar]	Tqst mod. opti. [K]	Pqst mod. opti. [bar]	ΔQ_{+comb} calage [MJ/kg]
0,000			298,2	1,01	298,2	1,01	
0,040	679,6	2,33	679,6	2,34	664,3	2,29	9,27
0,120	1237,6	4,36	1237,6	4,38	1265,4	4,47	8,59
0,360	2447,8	9,32	2447,8	9,31	2444,0	9,30	8,90
0,663	3503,0	14,59	3503,0	14,52	3280,8	13,6	9,80
						Optimal	8,90

Tableau II.6 Résultats comparatifs pour le TNT

M explosif [kg]	Tqst cheetah [K]	Pqst cheetah [bar]	Tqst Modèle [K]	Pqst modèle [bar]	Tqst mod. opti. [K]	Pqst mod. opti. [bar]	ΔQ_{+comb} calage [MJ/kg]
0,000			298,2	1,01	298,2	1,01	
0,040	550,7	1,92	550,7	1,91	529,7	1,83	8,63
0,120	915,1	3,24	915,1	3,28	928,3	3,32	7,71
0,360	1717,8	6,79	1717,8	6,77	1783,4	7,03	7,48
1,080	3085,5	15,50	3085,5	15,48	3031,3	15,21	8,10
2,268	4139,0	28,16	4139,0	28,13	3815,1	25,93	8,95
						Optimal	7,89

Tableau II.7 Résultats comparatifs pour le V401

Les valeurs de ΔQ_{comb} optimales obtenues sont respectivement pour le TNT et le V401 de 8,9 MJ/kg et de 7,89 MJ/kg sous cette formulation.

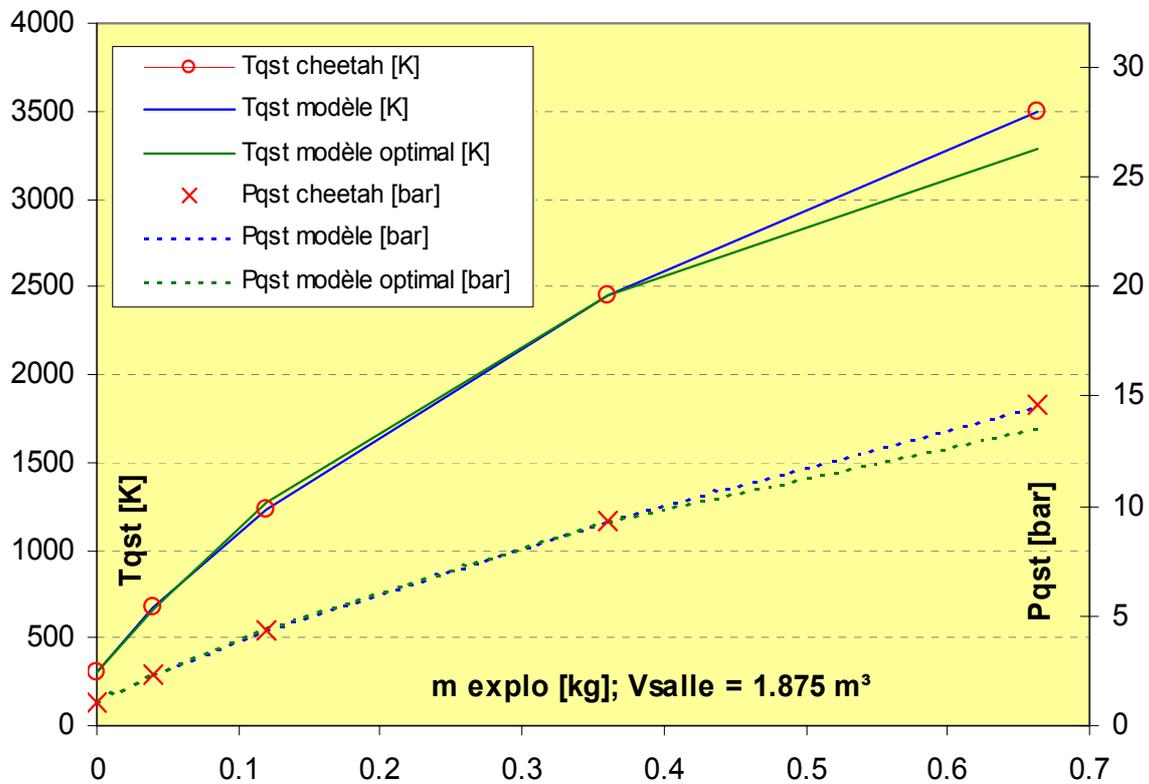


Figure II.43 Résultats comparatifs pour TNT – application au cas du bunker de volume 1,875 m³

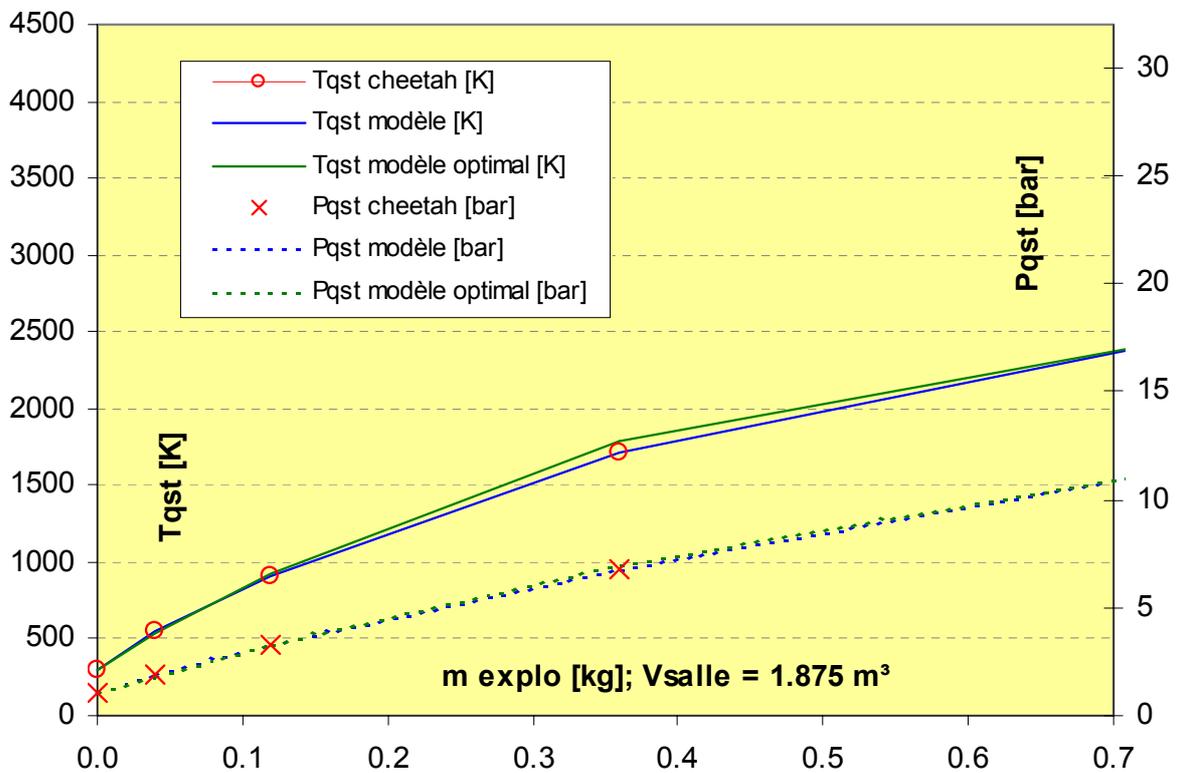


Figure II.44 Résultats comparatifs pour le V401 – application au cas du bunker de volume 1,875 m³

On précise ici qu'un calcul simple montre que la postcombustion totale d'un kilogramme d'explosif nécessite environ 0,83 m³ d'air pour l'octogène, et 2,83 m³ pour le TNT. La gamme de densité de chargements prise en compte par cette approche analytique est supérieure à celle utilisée pour le calage du modèle empirique présenté au paragraphe précédent, dont l'intervalle de validité est limité par la méthode de construction du modèle.

Comparaisons expériences / calculs et calculs thermochimiques / calculs CHEETAH

L'analyse bibliographique a permis de recenser plus d'une centaine de résultats (expérimentaux ou numériques) de détonation en milieu clos, pour divers explosifs à différentes densités de chargement et sous différentes atmosphères.

Parmi ces résultats, nous retiendrons ici 32 valeurs qui correspondent à du TNT sous atmosphère "air", avec des taux de chargement variant de 0,0032 kg/m³ à 3 kg/m³. Il faut noter ici que notre modélisation suppose un excès d'oxygène.

Référence	Explosif	Masse [kg]	Volume [m3]	Taux [kg/m ³]	Atmosphère	QSP [bars]	QSP mod [bars]
Swisdak	TNT			0,00320	Air	1,2	1,2
Wolanski	TNT	0,0010	0,1070	0,00935	Air	1,6	1,6
Swisdak	TNT			0,01281	Air	1,7	1,8
Gerbam	TNT	0,2500	18,8700	0,01325	Air	1,5	1,8
Swisdak	TNT			0,01600	Air	1,9	2,0
Gerbam	TNT	0,5000	18,8700	0,02650	Air	2,2	2,5
Milne - Kesby	TNT			0,03000	Air	2,3	2,7
Swisdak	TNT			0,03200	Air	2,8	2,8
Zhang, Ripley	TNT	1,1000	26,0000	0,04231	Air	3,0	3,3
Kuhl et al.	TNT	0,8000	16,6400	0,04808	Air	3,8	3,6
Kuhl et al.	TNT	0,8750	16,6000	0,05271	Air	4,0	3,9
Kuhl	TNT	0,8750	16,6000	0,05271	Air	4,0	3,9
Gerbam	TNT	1,0000	18,8700	0,05299	Air	3,5	3,9
Kuhl	TNT	1,0000	17,0000	0,05882	Air	3,8	4,1
Milne - Kesby	TNT			0,06000	Air	4,6	4,2
CEG	TNT	0,1500	2,3560	0,06367	Air	3,8	4,4
CEG	TNT	0,1500	1,8750	0,08000	Air	4,5	5,1
Zhang, Ripley	TNT	2,2000	26,0000	0,08462	Air	4,5	5,3
CEG	TNT	0,2000	2,3560	0,08489	Air	4,7	5,3
Swisdak	TNT			0,09610	Air	5,6	5,7
Kinney-Graham	TNT			0,10000	Air	5,7	5,9
CEG	TNT	0,2000	1,8750	0,10667	Air	5,7	6,2
Gerbam	TNT	2,3900	21,8400	0,10943	Air	4,7	6,3
Swisdak	TNT			0,12810	Air	6,9	7,0
Neuwald	TNT	0,0010	0,0066	0,15152	Air	8,2	7,8
Zhang, Ripley	TNT	3,9600	26,0000	0,15231	Air	6,6	7,8
Swisdak	TNT			0,16000	Air	8,1	8,1
Swisdak	TNT			0,24000	Air	10,8	10,5

Tableau II.8 Comparaison littérature / calculs pour le TNT

Les figures II.45 et II.46 montrent que le modèle construit permet de calculer fidèlement les valeurs retenues issues de la littérature, malgré leur dispersion initiale.

Lorsque l'on sépare les données de la bibliographie en données expérimentales et données de simulation, on s'aperçoit que la corrélation de notre modèle avec les autres modèles de la

littérature est excellente ($P_{QST} \text{ modèle} = 0,995 P_{QST} \text{ littérature}$, $R^2 = 0,994$). Ce résultat peut s'expliquer si l'on considère que la plupart des modèles de la littérature sont également calés sur les résultats de codes de thermochimie tels que CHEETAH. Il est donc possible, lorsque les données existent, d'approcher encore mieux les résultats expérimentaux en calant le paramètre unique de notre modèle sur une valeur de pression mesurée, et non plus sur des calculs thermochimiques. Un nouveau calage du modèle donne pour le TNT et l'air stœchiométrique associé une valeur de ΔQ_{+comb} égale à **7,680 MJ/kg**, plus basse que celle obtenue précédemment à partir des calculs CHEETAH. Ce résultat est logique et montre, au-delà de la valeur affichée, que sur un jeu de données expérimentales très hétéroclites, le processus de combustion secondaire des DP a une efficacité très relative. Les résultats de la nouvelle comparaison littérature / modèle sont présentés en figure II.47.

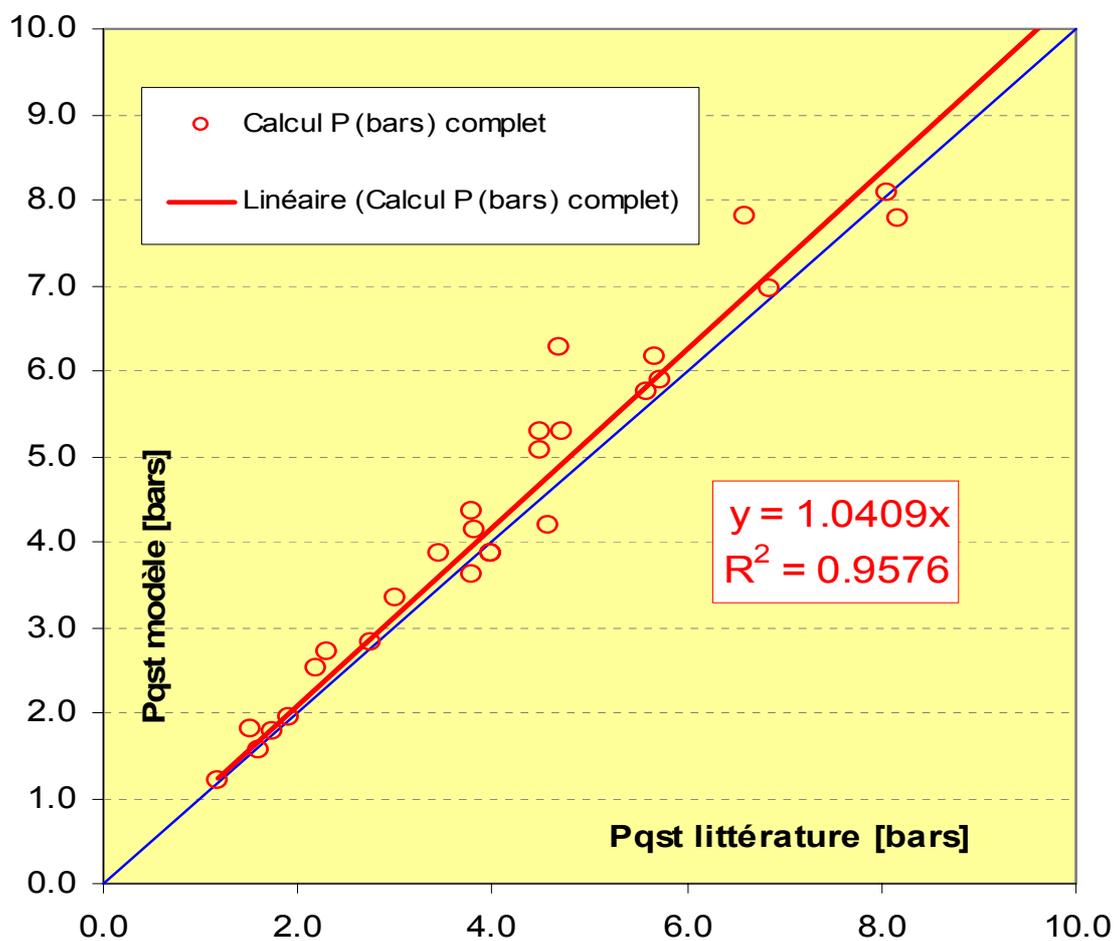


Figure II.45 Corrélation P_{QST} littérature / P_{QST} modèle

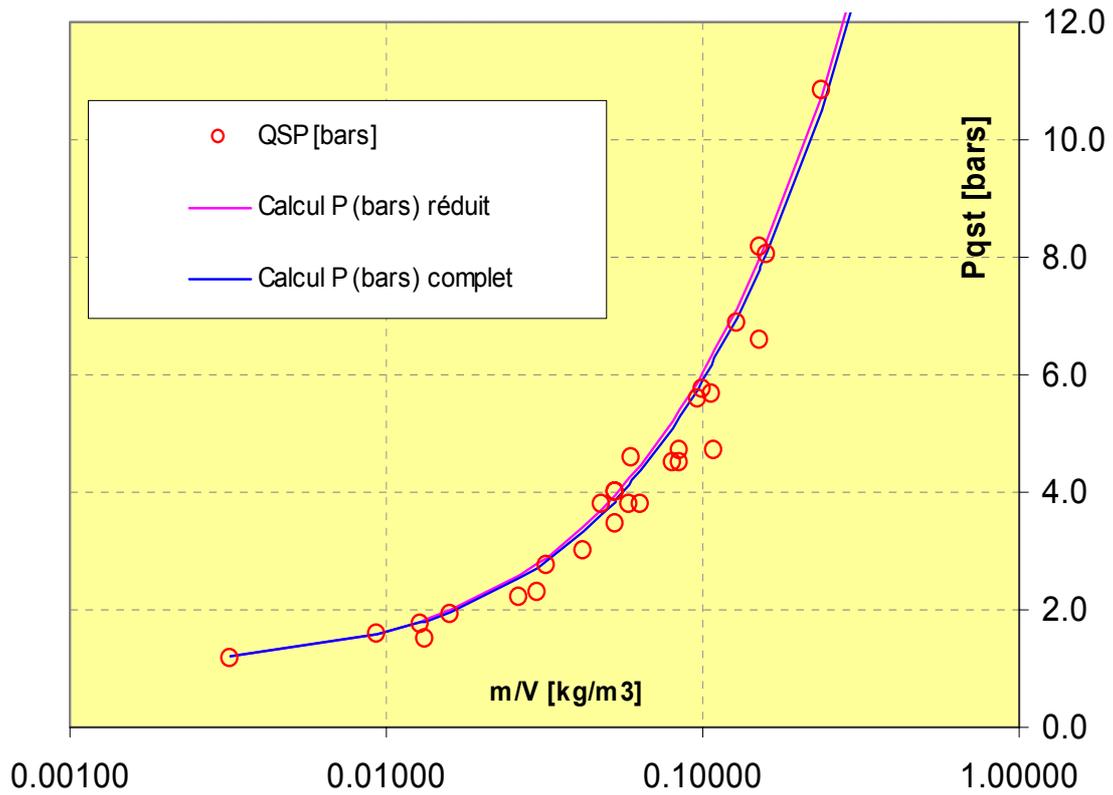


Figure II.46 $P_{qst} = f(m_{explosif}/V_{salle})$ – modèle à une température

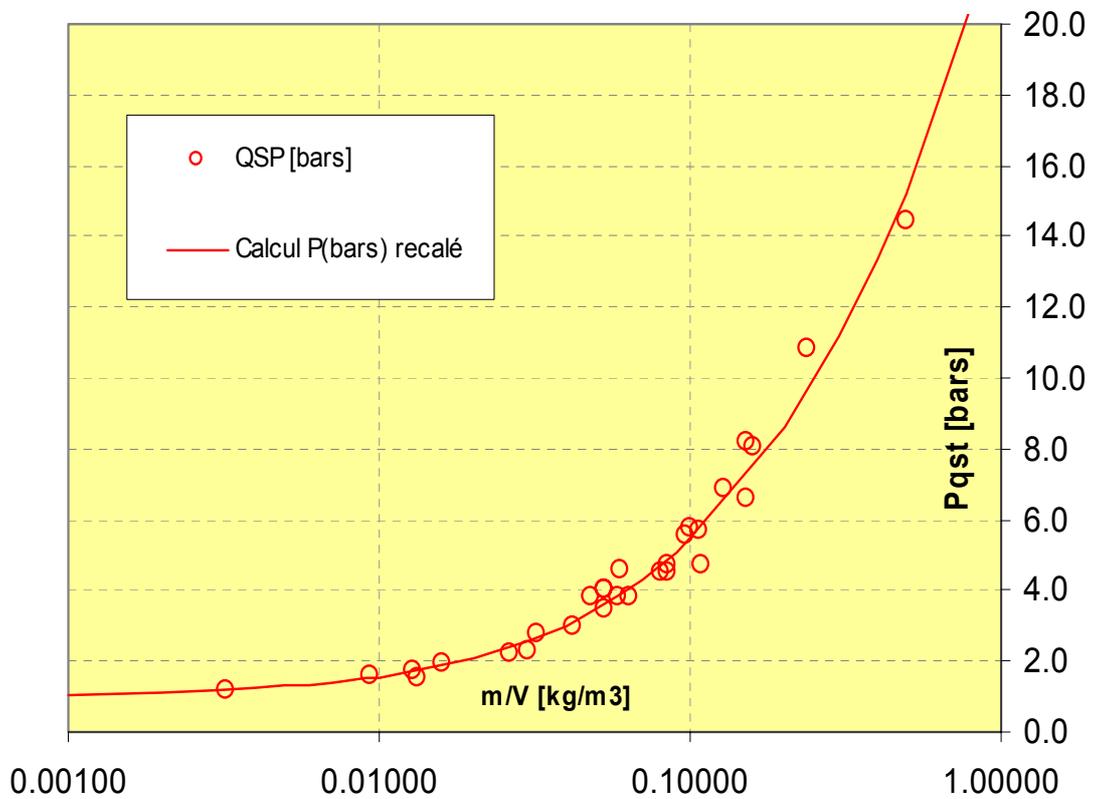


Figure II.47 $P_{qst} = f(m_{explosif}/V_{salle})$ – modèle à une température recalé

Ce modèle simple décrit dans la présente section est donc capable de prédire l'état quasi-statique théorique atteint dans la salle lors de la détonation d'un explosif en présence d'un excès d'air. Toutefois, on rappelle que les résultats expérimentaux et numériques obtenus par ailleurs montrent clairement que l'hypothèse d'état quasi-statique, parfaitement vérifiée pour la pression, n'est absolument pas valable pour la température.

Compte tenu des nombreuses hypothèses ou approximations formulées, on ne peut qualifier ces valeurs de ΔQ_{+comb} que de « cohérentes » par rapport aux compositions chimiques initiales des explosifs et à nos résultats expérimentaux. Les écarts constatés s'expliquent par le chemin thermodynamique modélisé ici, l'incertitude relative à l'énergie de détonation (notamment pour les expérimentations à petite échelle avec des charges explosives de petite dimension) et l'énergie de combustion secondaire effectivement libérées.

On rappelle les valeurs de l'énergie totale du TNT déduites des valeurs expérimentales de la pression quasi-statique atteinte dans le volume V :

- $E_{tot, exp} = 11,25$ MJ/kg pour les résultats expérimentaux du CEA Gramat
- $E_{tot, exp} = 10,981$ MJ/kg pour les résultats expérimentaux de l'ensemble de la bibliographie relative au TNT.
- $E_{tot, exp} = 12,7$ MJ/kg pour les résultats expérimentaux du LLNL pris également comme référence.

ΔQ_{+comb} représente respectivement pour ces trois valeurs une fraction de 79,1 %, 81 % et 70%.

Si l'on suppose que, entre un cas idéal et les expérimentations, l'énergie de détonation libérée est connue et identique, on peut tenter de déterminer la fraction d'énergie de combustion secondaire effectivement fournie au système. Cette hypothèse est fautive de prime abord puisque l'énergie de détonation dépend du confinement de l'explosif, i.e. de la dynamique de détente des produits de détonation. On écrit alors :

$$E_{tot,exp} = E_{det} + xE_{AB}$$

avec x compris entre 0 et 1.

En prenant pour E_{det} la valeur de référence d'Ornellas de 4,567 MJ/kg, et une valeur de l'énergie totale de 14,689 MJ/kg, on en déduit les valeurs de x correspondantes, soient respectivement 0,66, 0,634 et 0,8.

Ceci traduit une combustion secondaire partielle, malgré l'excès d'air, dont l'efficacité dépend de la configuration de l'expérimentation.

Pour l'octoviton, la valeur de ΔQ_{+comb} représente 99,7 % de $E_{tot,exp}$ qui est égale, sur l'ensemble des expérimentations réalisées au CEA Gramat à 7,912 MJ/kg. A partir d'un raisonnement analogue consistant à considérer l'énergie de détonation comme fidèlement connue et ayant pour valeur 6 MJ/kg, on détermine une valeur de $x = 0,52$ seulement.

Il faut à ce stade de l'analyse thermochimique apporter les commentaires suivants :

- Nous avons supposé et traduit la présence d'eau sous forme vapeur. Que ce soit lors des expériences de calorimétrie en laboratoire ou lors des expérimentations de détonation en milieu clos, il est impossible de valider cette hypothèse, compte tenu notamment des phénomènes de condensation. A l'ouverture de la bombe calorimétrique, on constate visuellement la présence d'eau en phase liquide. Inversement, nous n'avons pas pris en compte la présence d'eau dans l'atmosphère, qui, au cours des expérimentations extérieures, peut s'avérer non négligeable. Une correction prenant en compte la présence d'eau liquide induit une variation de l'ordre de 5% (selon la nature de l'explosif utilisé) de l'énergie de combustion mesurée.
- Les autres conditions initiales ont également une influence sur les quantités d'énergie réellement libérées : les expérimentations mettant en œuvre de l'explosif se déroulant à l'extérieur, la température de travail peut varier entre -5°C et 35°C (relevés effectués sur l'ensemble des expérimentations réalisées au CEA Gramat). Les calculs simplifiés précédents considèrent une transformation entre une température ambiante égale à 298 K et la température finale quasi-statique. Ne pas prendre en compte la valeur réelle de la température initiale peut conduire à des écarts de l'ordre de 2% (selon le type d'explosif utilisé) sur la valeur de la pression quasi-statique.

Ces deux remarques prennent tout leur sens si l'on précise que dans la littérature ouverte, les conditions expérimentales initiales en hygrométrie, en température et en pression, ni une quelconque méthode de correction des résultats ne sont précisées.

Ces quelques développements finaux confirment les conclusions que nous avons déjà formulées : il est nécessaire de déterminer par simulation expérimentale l'état final thermodynamique atteint en fin de processus de combustion secondaire pour une configuration donnée et un explosif donné. L'utilisation d'un calorimètre de détonation couplée à une analyse des espèces gazeuses permettrait de lever les inconnues du problème dans une situation idéale ou tout du moins de référence.

La dispersion des résultats bibliographiques ou obtenus au CEA Gramat laisse toutefois présager que l'on peut réduire le champ d'investigation à des configurations génériques, portant à la fois sur la forme globale du volume V , le taux de chargement W et la balance en oxygène de l'explosif, en conservant une bonne approximation de l'état final.

La réalisation de simulations numériques doit permettre d'augmenter ce nombre d'expériences mais les codes utilisés devront retranscrire de manière fidèle la dynamique des DP et des ondes de choc d'une part, de disposer d'une description fine des réactifs en présence et des réactions de combustion d'autre part, afin de quantifier l'énergie réellement libérée dans le système à volume constant.

Un autre calcul thermochimique de type bilan énergétique pourrait être tenté en stipulant comme nous l'avons fait précédemment l'existence d'une zone chaude et d'une zone dite froide. Le schéma ci-dessous illustre cette hypothèse :

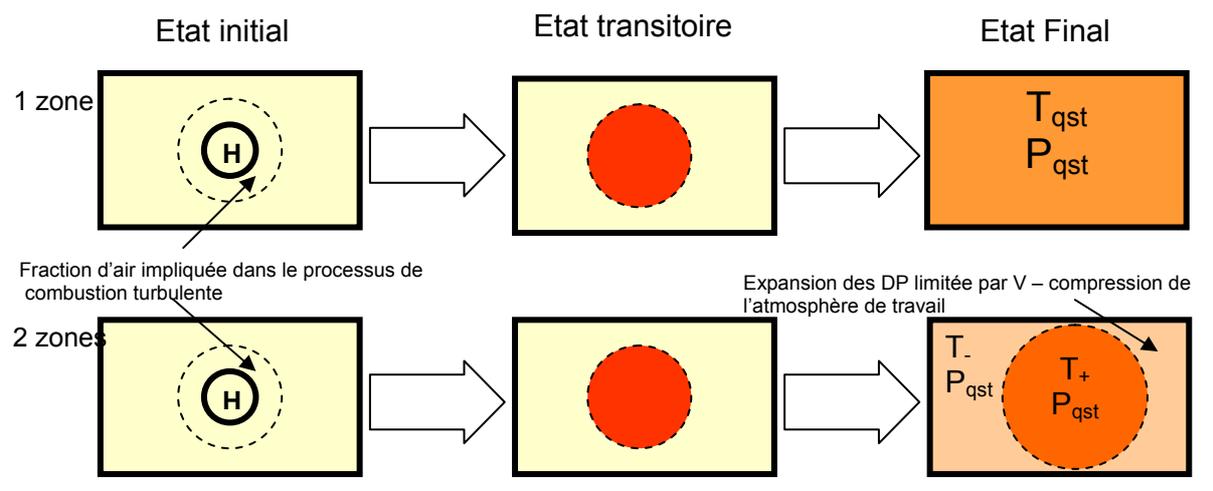


Figure II.48 Schéma de principe des transformations idéalisées et modélisées

Cependant, l'introduction de deux températures d'équilibres nécessitent de choisir des hypothèses trop restrictives afin de pouvoir résoudre le système résultant (par exemple, une compression adiabatique de la fraction d'air non concernée par le processus de combustion). Une telle approche n'est donc pas développée ici car elle n'apporte rien de plus à la compréhension des phénomènes et induit un calage non physique de paramètre pour restituer les données expérimentales.

On va alors dans la suite du mémoire se pencher sur l'évolution temporelle de la pression au sein du milieu clos, afin de déterminer des modèles 0D(t).

II.2.3 Modélisation 0D(t) de la montée en pression du milieu

Grâce à la description phénoménologique du chapitre II.1, nous avons vu que la montée en pression d'un volume V fermé soumis à une explosion interne peut se voir comme la superposition d'un signal pseudopériodique évanescent due à la propagation des ondes de choc, et d'un signal continu traduisant une montée en pression quasi-statique homogène du milieu.

La figure II.49 déjà utilisée pour expliquer notre méthode de détermination de P_{qst} illustre parfaitement ce propos. En effet, nous avons vu que, en deux points distincts du volume V , la forme du signal de pression ne varie pas. Dans la gamme de taux de chargement en explosif étudiée, cette remarque revient à considérer qu'à tout moment il y a équilibre de pression quasi-statique, si l'on occulte les phénomènes rapides de variation de pression. D'un point de vue « traitement du signal », cela revient à supprimer les hautes fréquences (application d'un filtre passe bas avec une fréquence de coupure inférieure à 200 Hz par exemple) et de ne retranscrire que les variations de temps caractéristiques élevés.

II.2.3.1 Traitement des courbes et méthode d'approximation

Si l'on retranscrit graphiquement cette opération de filtrage, on obtient typiquement la figure II.49. La courbe bleue foncée montre encore quelques oscillations mais on note une élévation continue de la surpression en fonction du temps. L'opération de filtrage s'effectue sur l'ensemble du signal auquel on a supprimé le premier front de choc : l'origine temporelle de la courbe

obtenue correspond en première approximation au temps d'arrivée de l'onde de choc au niveau du capteur de pression. Autrement formulé, ceci revient à négliger le temps nécessaire à la détonation de la charge et le temps de propagation de la première onde de choc par rapport aux temps total nécessaire à l'établissement de la pression quasi-statique. Cet aspect temporel doit être traité avec rigueur si l'on veut retranscrire, dans l'esprit du mémoire, les événements de basses fréquences au sein du système étudié.

Sans préjuger à ce niveau de leurs formes exactes, les courbes obtenues après traitement sont croissantes (même strictement croissantes à partir de $t > 0$ pour répondre à la physique du problème) sur l'intervalle temporel fixé. Elles présentent de plus une asymptote horizontale lorsque t tend vers l'infini dont l'équation est évidemment $y = P_{qst}$.

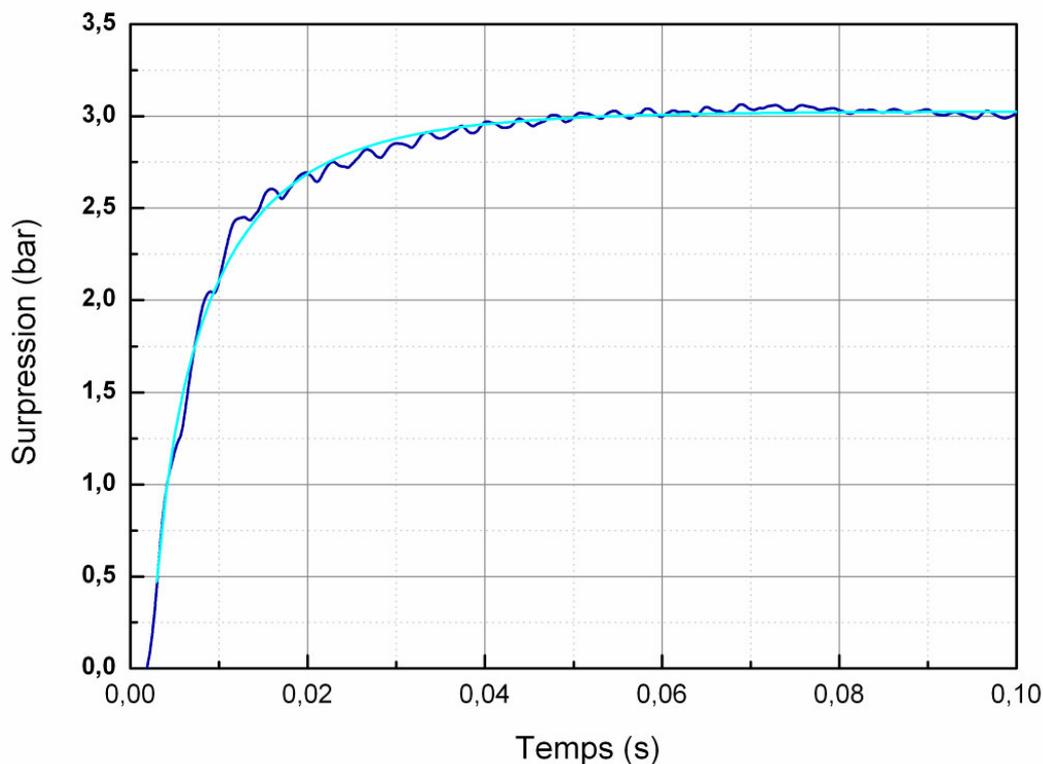


Figure II.49 Courbes de surpression interne au volume V obtenues : a/ Après application d'un filtre passe bas (courbe bleu foncé), b/ Après approximation par une fonction de type exponentielle croissante (courbe bleu clair)

Dès lors, on peut extraire des courbes des informations relatives à la dynamique du système à volume constant.

On cherche tout d'abord le temps de montée en pression, c'est à dire le temps nécessaire à la surpression pour atteindre une valeur de $0,632.P_{qst}$. En effet, compte-tenu des remarques précédentes, la surpression peut s'écrire sous la forme :

$$\Delta P(t) = P_{qst} f\left(\frac{t}{\tau_m}\right) \text{ avec } \Delta P(0) = 0,$$

τ_m étant un temps de montée et f une fonction répondant à nos définitions. On obtient alors des valeurs de τ_m en fonction du taux de chargement en explosif et de la configuration du volume V . La figure II.50 présente les résultats pour les expérimentations avec du TNT, pour les trois types de chambre de tir du CEA Gramat. L'axe des ordonnées représente le temps réduit par la masse d'explosif à la puissance 1/3. L'axe des abscisses représente l'inverse du taux de chargement également à la puissance 1/3. Ce graphique montre que sur notre intervalle d'étude en W , les temps de montée réduits ont un comportement quasi-linéaire. Autrement dit, on s'aperçoit que τ_m est directement proportionnel à $V^{1/3}$ en première approximation :

$$\tau_m = A_{ex} V^{1/3} \text{ avec } A_{ex} \text{ propre à un explosif donné, en s/m.}$$

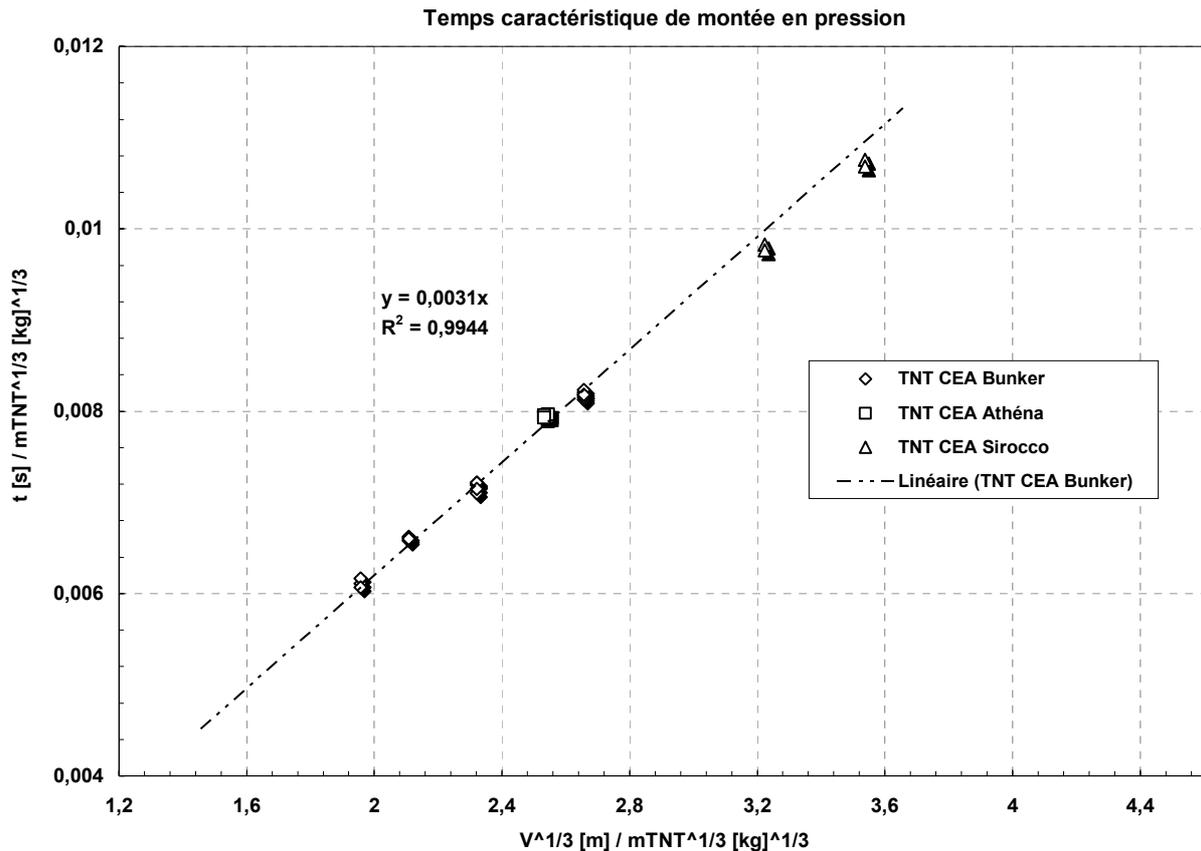


Figure II.50 Temps de montée en pression du volume V – résultats expérimentaux obtenus après traitement des signaux bruts

L'analyse bibliographique nous avait conduit notamment aux valeurs de Ripley [105] obtenues dans un contexte équivalent au notre, mais défini comme le temps nécessaire pour atteindre 95% de P_{qst} . Pour cet auteur, le temps de montée est fonction du taux de chargement, et donc de la quantité d'explosif. Plus précisément, les résultats publiés ont conduit l'auteur à définir le temps de montée en pression comme une fonction croissante de la masse d'explosif, lorsque l'air est en excès.

Notre analyse dément -ou précise - cette affirmation, sur notre intervalle d'étude en W : on affirme que le temps de montée est indépendant de la masse mais est caractéristique d'un explosif donné. On retiendra que, en appliquant notre méthode de dépouillement des signaux de pression :

- pour le TNT, $\tau_m = 0,0031V^{1/3}$, avec A_{TNT} compris entre 2,99 et 3,15 ms/m sur l'ensemble des résultats, pour un écart type de 0,036 ms/m.
- pour le V401, $\tau_m = 0,0042V^{1/3}$ avec A_{V401} compris entre 4,17 et 4,22 ms/m sur l'ensemble des résultats, pour un écart type de 0,021 ms/m.
- Les valeurs de A montrent une plus faible dispersion et un écart type sensiblement inférieur pour le V401, ce qui corrobore nos constatations précédentes. Le procédé de combustion secondaire des produits de détonation du V401 d'un point de vue thermochimique est plus simple que celui propre au TNT : les schémas réactionnels sont de par la nature des réactifs en présence moins sensibles aux variations de conditions initiales. A même valeur de W, l'efficacité globale des réactions est par exemple moins sensible à la géométrie du volume V pour un explosif faiblement sous-oxygéné.

Au sein du système à volume V constant, et sur cet intervalle de W, la vitesse de réaction de combustion secondaire est donc une caractéristique intensive du problème.

Si l'on reprend en effet notre définition générique précédente, et que l'on suppose un instant que τ_m dépend de la masse d'explosif m :

Puisque,

$$\frac{\partial \Delta P(t)}{\partial t} = \frac{P_{qst}}{\tau_m} f' \left(\frac{t}{\tau_m} \right)$$

Et si

- On suppose ici que $f'(0)$ est différent de zéro (on abordera ce point plus en aval dans le mémoire).
- On rappelle que P_{qst} est directement proportionnel à la masse m d'explosif sur notre domaine d'étude.
- Par définition également, τ_m est nul si m est nulle.

Alors,

- o Si τ_m est proportionnel à m, $\tau_m = a.m$, alors $\left. \frac{\partial \Delta P(t)}{\partial t} \right)_0$ est indépendant de m.
- o Si τ_m est une fonction quelconque de m de degré supérieur, alors $\left. \frac{\partial \Delta P(t)}{\partial t} \right)_0$ est une fonction décroissante de m.

Ces deux propositions se heurtent à la nature physique du processus que nous voulons modéliser et aux hypothèses que nous avons formulées. En effet, la montée en pression du milieu est due dans notre cas à la production brutale de gaz par la détonation de la charge puis à la combustion

secondaire des produits de détonation avec l'oxygène de l'air, amplifiée et entretenue par les ondes de choc:

- Nous avons défini l'origine temporelle du signal approché comme étant un état postérieur à la détonation de la charge.
- L'étude de la détonation aérienne de charges sphériques nous a permis de connaître le temps nécessaire à la détente des produits de détonation soit, en fonction du rayon initial de la charge, un temps $t = 0,03 R_0$ en secondes, si R_0 est exprimé en mètres.
- L'évolution de la boule de feu est pilotée par le caractère hautement dynamique de l'écoulement. C'est la turbulence inhérente à la zone de mélange qui gouverne le mélange entre le comburant et le combustible (dans les premiers instants).
- L'origine des temps recalée correspond donc à un état intermédiaire, au cours de la détente des DP.
- Que ce soit au cours de la détente initiales des DP, puis au cours du mélange turbulent par réflexion des ondes de choc dans le volume V , nous sommes dans le cas d'une réaction de combustion non pré mélangée, où la diffusion des espèces est mécaniquement forcée.

On peut résumer ces propos par la proposition suivante : le processus global de combustion et donc de montée en pression du milieu est une transformation exothermique brutale, dont le démarrage (i.e. la pente à l'origine) est, au niveau de l'origine temporelle définie, et dans le cadre de la décomposition du signal en une somme de deux fonctions liées respectivement aux variations rapides et lentes de pression, une discontinuité de vitesse. La vitesse de réaction à l'origine $\left. \frac{\partial \Delta P(t)}{\partial t} \right)_0$ est nécessairement non nulle et est une fonction croissante de la masse d'explosif. Ceci est contradictoire avec un temps de montée en pression dépendant de la masse d'explosif.

Plus que la masse elle-même, c'est un volume ou une surface de réactions possibles à $t=0$ que l'on doit considérer. Ce volume, ou surface, étant directement proportionnel à la quantité de matière présente. Le type de réaction de combustion que nous étudions ici est une situation particulière, puisque pilotée par l'hydrodynamique du système. Ces quelques développements montrent également que nous sommes dans un cas distinct des réactions de combustion non pré mélangée classiques gouvernées par les phénomènes de diffusion, pour lesquelles l'hypothèse de Frank-Kamenetskii peut être formulée.

On trouve en partie dans cette formulation une justification physique aux différences constatées sur la constante A entre le V401 et le TNT : au sein d'un volume identique, le processus de montée en pression du volume V est plus long lorsque du V401 est initié en détonation. L'équilibre mécanique est plus *difficile* à atteindre pour un explosif de ce type dont la composition des produits de détonation est pauvre en chaînes carbonées et en molécules oxydables. La cinétique de réaction globale est pilotée par la probabilité de rencontre entre réactifs.

En dehors de l'intervalle $[0,01 - 0,3]$ kg/m³, ces conclusions ne sont plus valables. Lorsque le taux de chargement en explosif est élevé, il n'y a plus invariance de la dynamique de mélange et l'oxygène de l'air est rapidement en défaut. Inversement, lorsque W est inférieur à la borne basse de cet intervalle, les temps de propagation des ondes ne sont plus négligeables devant la durée

totale du phénomène. La dynamique globale (la chronologie des événements et l'importance des processus de mélange) est dans ce cas différente de celle du problème étudié. Dans les deux cas extrêmes, les notions d'équilibre en pression et de pression quasi-statique n'ont pas de sens physique.

On continue ci-dessous l'analyse des résultats expérimentaux afin de préciser leurs domaines de validité.

Ces résultats sont issus du traitement de 25 courbes pour le TNT, de 42 courbes pour le V401. La dispersion des valeurs expérimentales est inférieure à 3%. La figure précédente (figure II.50) amène cependant quelques précisions supplémentaires :

- si on restreint l'analyse aux seules expérimentations « bunker », cette dispersion est plus faible, pour les deux explosifs. La géométrie relative de la charge d'explosif par rapport à la géométrie du volume (rapport des longueurs caractéristiques par exemple), a une influence directe sur le temps de montée de la pression pour un explosif donné. Il peut y avoir amplification de la vitesse instantanée de réaction. Le nombre de courbes analysables n'est pas suffisant et le protocole de traitement choisi n'est pas assez sensible pour déterminer de manière fiable l'influence de la géométrie.
- L'approximation linéaire n'est bien entendu valable que sur cet intervalle d'étude. Pour des valeurs de $(V/m)^{1/3} < 1,5$, on se situe dans le domaine où l'air est en défaut (par rapport au TNT). Inversement, pour des valeurs grandes de V/m , le processus d'homogénéisation de la pression par les allers retours d'ondes n'est plus réaliste.

On trace maintenant sur un même graphique (figure II.51) nos résultats et les données issues de la bibliographie, qui sont de trois ordres :

- les temps de montée à 86 % issue de simulations EDEN de l'explosion de charges de TNT dans un volume de 27 m³ [88, 101, 139], avec un modèle de combustion secondaire simplifié.
- Les données de Ripley déjà mentionnées,
- Et les valeurs issues de deux jeux de courbes du LLNL [117] pour la détonation d'une charge de TNT dans un volume de 16 m³.

On observe tout d'abord que les temps de montée déduits des simulations EDEN obéissent également à une loi linéaire par rapport à $V^{1/3}$. Si ce segment de droite se trouve logiquement au dessus des résultats « Bunker », les valeurs données par la simulation sous-estiment ce temps caractéristique (écart relatif de 12%) si on ramène les temps de montée à une définition équivalente. Outre la différence de géométrie initiale, ceci vient du fait que le modèle de combustion utilisée dans le code est simplifié par rapport au problème réel quant au nombre d'espèces présentes et au nombre de réactions associées. Les valeurs trouvées dans la référence [105], représentant des temps de montée à 95%, se situent de manière aléatoire sur ce graphique. Ces résultats sont peu exploitables et démontrent une nette incohérence. Enfin, les expérimentations de Kuhl et al., menées au LLNL complètent ces données et nous permettent de rajouter le point rouge sur la graphique. Le temps correspondant est cohérent avec nos propres résultats, mais est toutefois inférieur. Ce résultat montre une fois encore l'influence de la

géométrie de l'expérience. De plus, nous avons constaté que les expériences menées au LLNL sur des charges de TNT conduisaient globalement à des états finaux en pression majorants par rapport aux autres données disponibles. Ce constat de gain de performance est également valable ici en ce qui concerne la vitesse globale de réaction. En conditions maîtrisées et reproductibles, les expérimentations menées au LLNL font état d'une libération d'énergie *efficace*.

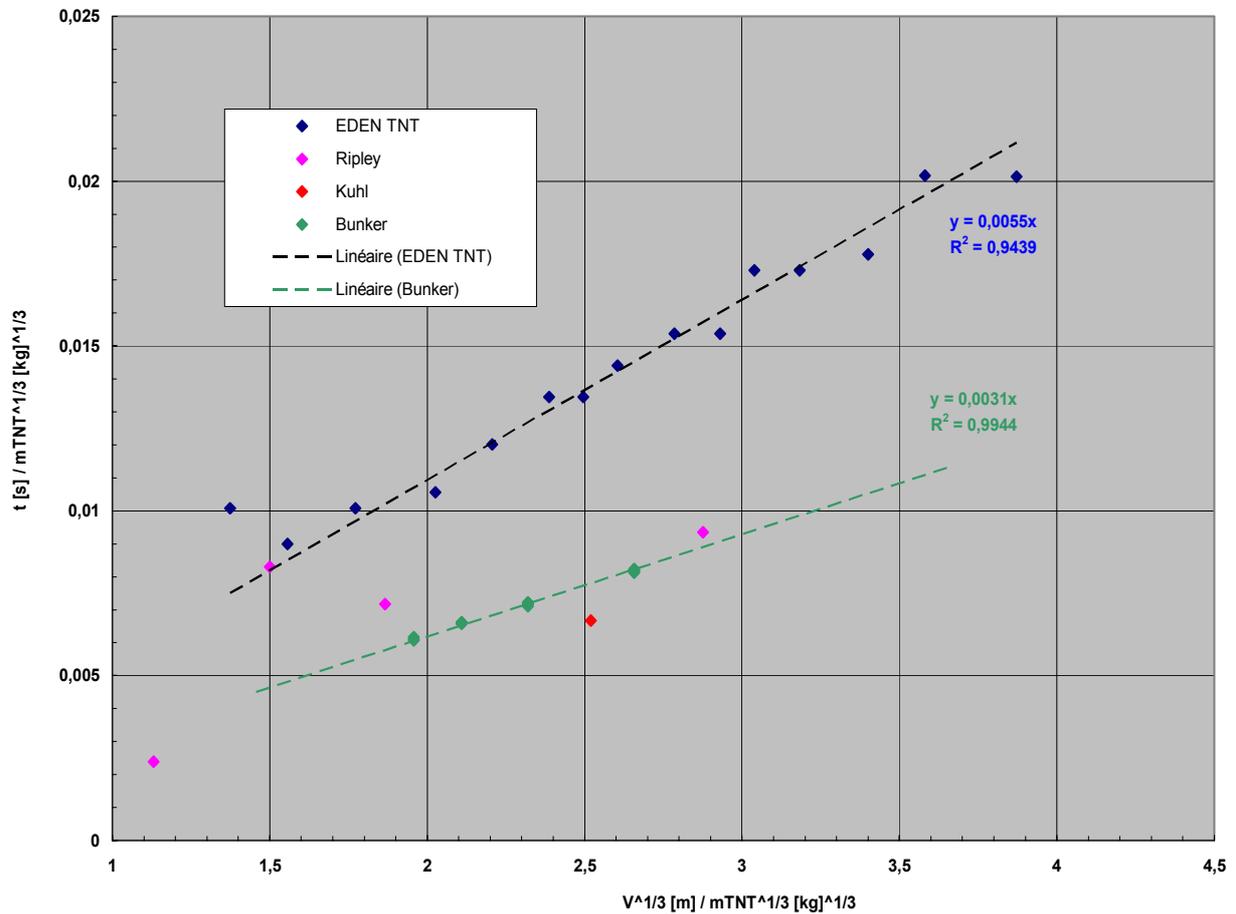


Figure II.51 Comparaison des temps de montée en pression mesurés par rapport aux résultats de la bibliographie

A nouveau, les expérimentations réalisées au CEA Gramat montrent que des expérimentations à petite échelle permettent de reproduire des situations à pleine échelle. Il y a sur notre domaine d'étude non seulement conservation de l'état final en pression mais aussi une dynamique de mélange des espèces et des réactions de combustion similaire. Là encore, des limites identiques apparaissent : en dehors de notre plage d'étude, le temps de montée en pression ne peut plus être vu comme étant directement proportionnel à $V^{1/3}$.

La géométrie du volume de travail a également une influence sur le temps de réaction. Dans le cas d'une géométrie complexe, le passage d'un scénario réel à un essai à échelle réduite doit faire l'objet d'une attention particulière si l'on veut conserver tous les aspects du fonctionnement d'une charge explosive. A nouveau, ces problèmes limites peuvent être résolus par des simulations numériques coûteuses si l'on possède une description fine des cinétiques de réaction.

On va maintenant chercher un formalisme générique de l'évolution de la pression interne au volume V , à l'aide de fonctions simples, sur notre domaine d'étude en W .

II.2.3.2 Fonctions descriptives de « durée de vie » de réactifs appliquées à la détonation en milieu clos

Nous avons adopté un type de traitement et d'analyse des signaux de pression mesurés - déjà évoqués et justifiés à plusieurs reprises dans ce mémoire - que l'on retrouve dans quelques publications [111 à 120], notamment dans l'article de Kuhl [117], illustré en figure II.52. Ce même auteur aborde dans [111] d'une manière générale la dynamique de systèmes fermés (ou fermés pendant un certain temps) au sein desquels se déroulent des réactions de combustion.

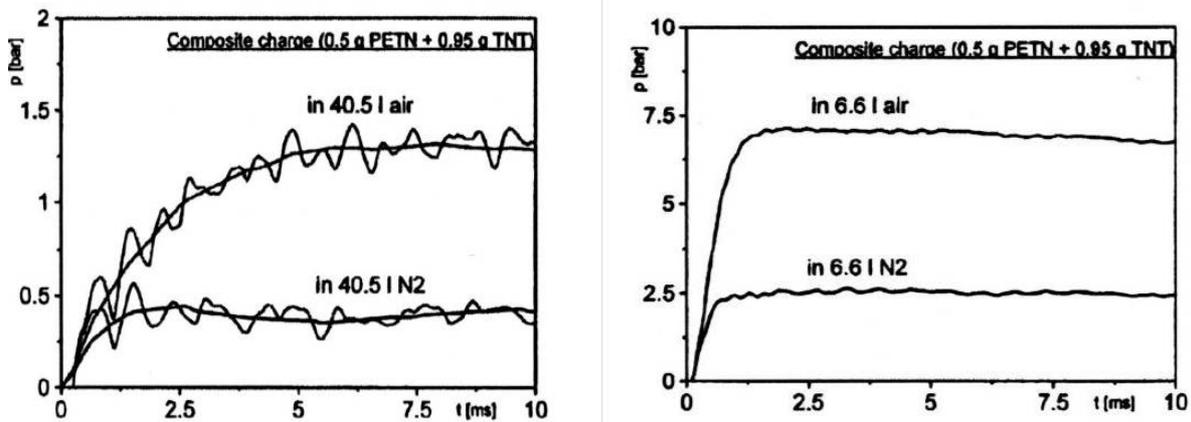


Figure II.52 Approximation de signaux de surpression interne par des fonctions croissantes continues - cas de l'explosion de charge de TNT dans de l'air ou de l'azote [117]

Nombre de systèmes physiques ou biologiques évoluent temporellement selon des lois de type exponentielles croissantes. On peut citer parmi les exemples les plus connus, les travaux de Semenov [73,74] : au sein des nombreux travaux portant sur les processus physico-chimiques, c'est la théorie des réactions en chaînes qui a conduit à l'avènement de telle formulation simplifiée. Semenov a élaboré une description minutieuse des cinétiques chimiques dans le cas de réactions exothermiques entre gaz (à volume constant) qu'il a pourtant réussi à réduire à des fonctions mathématiquement très simples. On citera dans le même ordre d'idée les travaux de Lotka [75], décrivant l'évolution temporelle d'une colonie de bactéries et plus généralement ceux de Volterra [76], retranscrits dans le traité intitulé « Les fondements de la théorie de la lutte pour la vie », qui décrivent tout processus comme la succession de trois phases : la naissance, ou apparition catastrophique du phénomène, la phase de production, et la phase de ralentissement conduisant à la fin (la mort) du processus.

La problématique générale est de retranscrire l'évolution d'un système correctement défini par une équation différentielle du type :

$$\frac{dX}{dt} = AX(1-X)$$

Les fonctions solutions ont des allures typiques. On parle dans la littérature anglo-saxonne de « S curves », courbes en forme de S, dont les asymptotes à l'origine et à l'infini sont symptomatiques des processus physiques (ou biologiques) sous-jacents et des phases de vie citées précédemment.

En combustion, et plus particulièrement en combustion au sein des moteurs, on peut relier les grandeurs physiques telles que la fraction de fuel brûlée ou la pression interne à la chambre cylindrique avec l'angle de vilebrequin (et donc au temps) au cours d'un cycle moteur. La figure II.53 montre des résultats typiques de mise au point de moteur. Outre la masse de fuel brûlée et la pression interne, la pression est représentée en fonction du volume de la chambre.

Les lois dites de Vibe en sont un exemple. Cette dénomination communément employée est à proprement parler un abus de langage puisque l'auteur [59] aborde de manière restrictive des phénomènes exothermiques dont la quantité de chaleur dégagée est représentée par une courbe dont la pente à l'origine est nulle et dont l'asymptote à l'infini a une pente finie. Les variables X du problème sont alors communément données par une équation du type :

$$X = 1 - \exp(-a_v t^{n+1})$$

Avec deux paramètres, n positif ou nul et a_v positif.

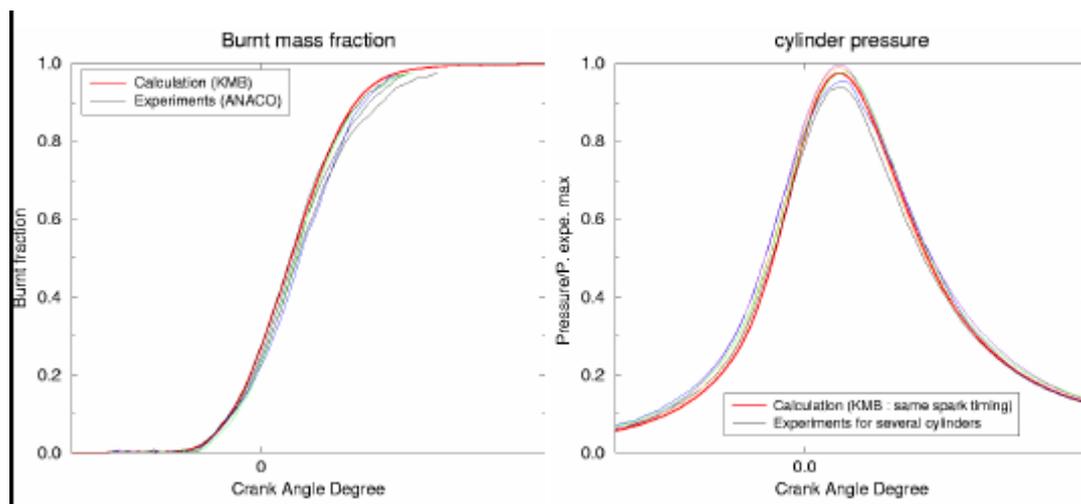


Figure II.53 Allures typiques de signaux enregistrés lors de la mise au point d'un moteur – comparaison des résultats (en rouge) avec un modèle 0D(t) (en noir)

Dans notre cas, nous voulons trouver une relation simple permettant de retranscrire la montée en pression d'un volume V, suite à la détonation d'explosifs appartenant à une même famille. Compte tenu des nombreuses inconnues quand au chemin thermodynamique réellement suivi par les produits de détonation ainsi que sur leurs réactions chimiques, on ne cherche pas à déterminer les taux de combustion des espèces présentes. En regroupant les espèces réactives comme une seule et unique espèce dénotée « fuel », ce type d'analyse peut être cependant tenté [117] pour un type d'explosif donné. Cette analyse se situe hors du champ de notre étude.

Autre différence, par rapport au cas de la chambre de combustion d'un moteur, le volume de travail V est ici constant. La montée en pression du milieu est due uniquement aux transformations thermodynamiques et aux réactions de combustion dans le système {air + explosif}

Les courbes obtenues après traitement des signaux de pression nous permettent de supposer une évolution de la pression interne selon une courbe en S.

On note :

$$\frac{\Delta P(t)}{P_{qst}} = X$$

On propose à ce niveau de l'étude d'approcher nos courbes expérimentales par des fonctions du type :

$$X = \frac{1 - \exp\left(\frac{-t}{\tau_m}\right)}{1 + K \exp\left(\frac{-t}{\tau_a}\right)}$$

X est sous cette forme le produit de deux fonctions, qui, selon les valeurs de τ_m et τ_a (comme temps d'activation), entrent en compétition pour traduire l'importance des temps caractéristiques des phénomènes physiques sous-jacents. On construit une telle formulation afin de généraliser notre démarche de modélisation d'une explosion à volume constant et, éventuellement, l'étendre par la suite à d'autres cas où des phénomènes physiques plus lents sont à l'origine de l'évènement catastrophique initial. On pense par exemple à l'échauffement lent ou à une agression chimique d'un matériau énergétique, pilotés par des processus diffusifs. Une fonction X qui suit cette formule présente en effet les particularités suivantes :

- la pente à l'origine est non nulle, et vaut :

$$X'(0) = \frac{1}{\tau_m(1+K)}$$

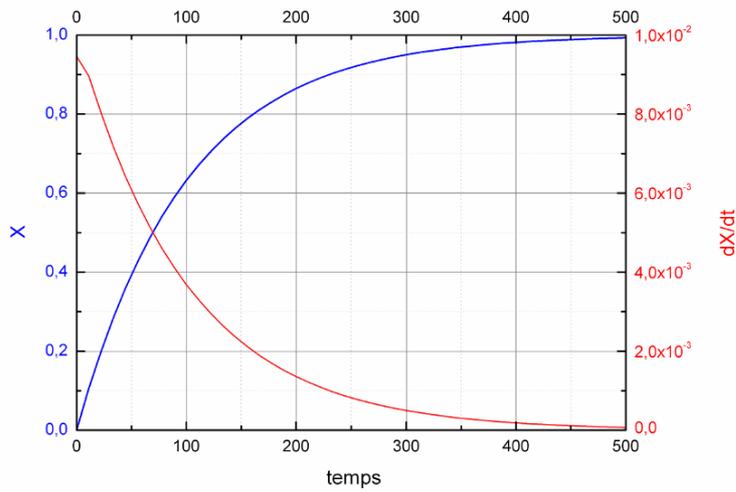
- la courbe présente un point d'inflexion. La dérivée première, toujours positive, présente un maximum puis diminue pour tendre vers zéro lorsque t tend vers l'infini.

La figure II.54 donne trois exemples d'allure de X et de sa dérivée première pour trois jeux initiaux de paramètres. La figure II.55 est un grossissement autour de l'origine de ces trois courbes représentatives de X . Lorsque $K = 0$ ou lorsque τ_a est très faible par rapport aux autres temps caractéristiques, on obtient une formule simplifiée (le terme au dénominateur est proche de 1). $X'(t)$ est maximale à l'origine. Plus K est élevé, les autres paramètres étant égaux, plus la pente à l'origine est faible. La valeur de τ_a détermine la position du point d'inflexion de X , qui correspond au temps pour lequel le taux de montée en pression est maximal.

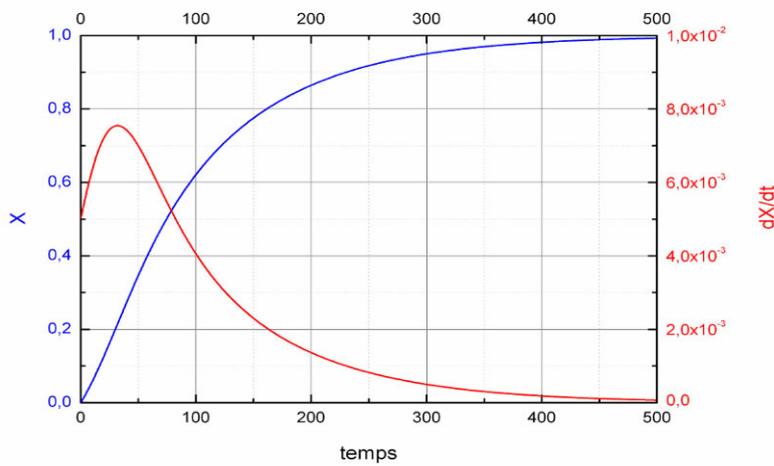
Lors d'une explosion, qu'il s'agisse de la détonation d'un explosif secondaire ou d'une déflagration, les réactions exothermiques sont initiées de manière très violente. L'activation est considérée

comme instantanée par rapport à l'échelle temporelle du problème. La phase active (phase de production) du processus de combustion interne a un temps beaucoup plus court que la durée totale du phénomène (durée de vie). La phase de fin de vie, ou de ralentissement, jusqu'à l'état final est également longue par rapport à la durée de la phase de production. On retient donc pour notre étude la formule simple suivante :

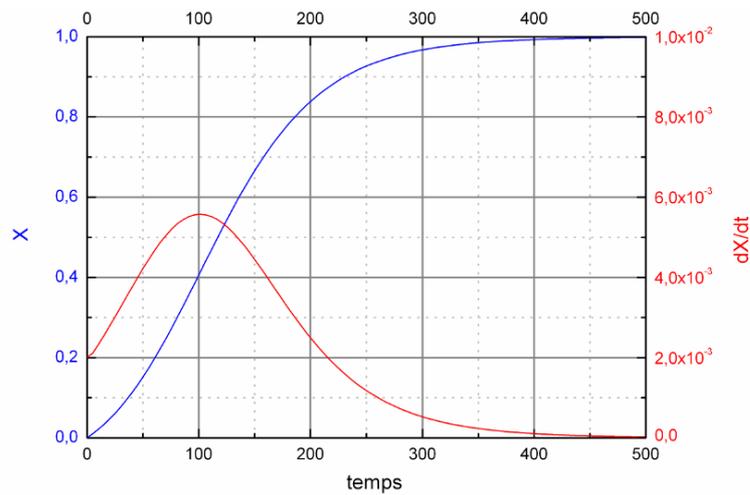
$$X = \frac{\Delta P(t)}{P_{gst}} = 1 - \exp\left(\frac{-t}{\tau_m}\right)$$



$$X = 1 - \exp\left(\frac{-t}{100}\right)$$



$$X = \frac{1 - \exp\left(\frac{-t}{100}\right)}{1 + \exp\left(\frac{-t}{25}\right)}$$



$$X = \frac{1 - \exp\left(\frac{-t}{75}\right)}{1 + 6 \exp\left(\frac{-t}{50}\right)}$$

Figure II.54 Exemples de lois exponentielles croissantes pour différentes valeurs de τ_m , τ_a et K

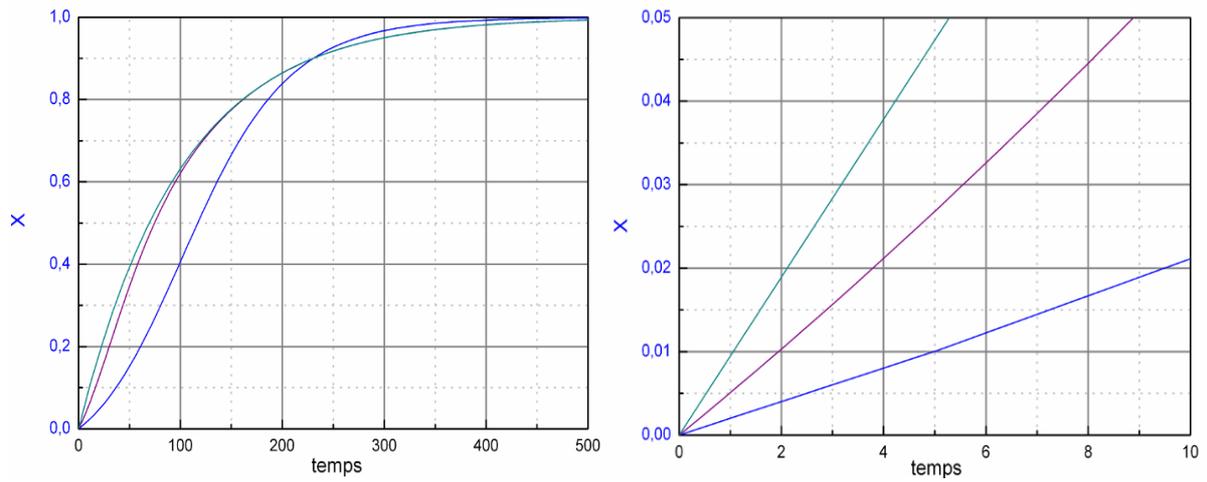


Figure II.55 Trois comportements à l'origine possibles des fonctions descriptives en fonction de la forme de la fonction choisie

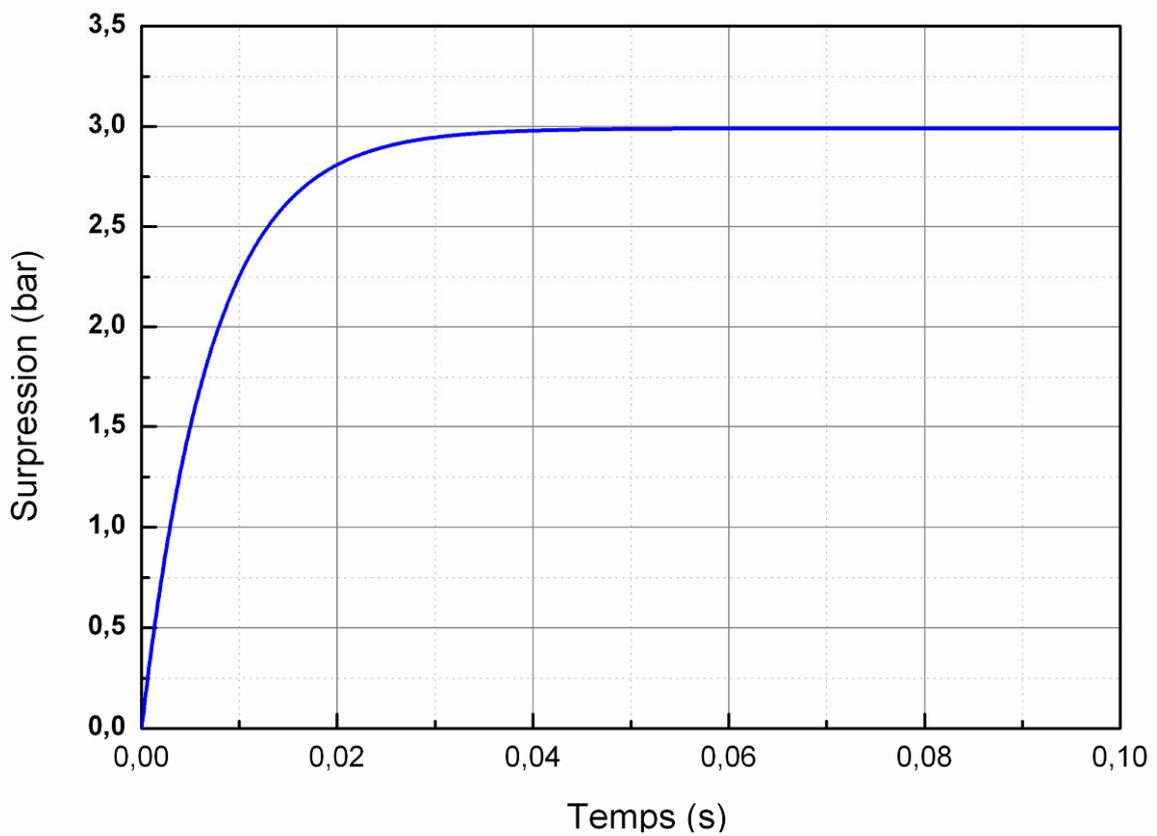


Figure II.56 Exemple de courbe de surpression obtenue après traitement des signaux et approximation par une loi exponentielle croissante.

Sur l'ensemble des courbes obtenues, on réalise alors successivement les opérations de filtrage telles que décrites précédemment puis on cherche la fonction exponentielle approchant de manière optimale la courbe filtrée. Pour cela, on impose notamment un intervalle réaliste pour τ_m , et le passage de la courbe par l'origine.

Au final, on obtient une fonction pour le TNT et une fonction pour le V401. Sur l'ensemble des expériences de détonation en milieu clos, le coefficient de régression R^2 est compris entre :

- 0,81 et 0,98 pour le TNT ;
- 0,85 et 0,99 pour le V401.

Ces deux intervalles se réduisent respectivement à [0,89 – 0,98] et [0,91 – 0,99] si on ne s'intéresse qu'aux courbes issues des expérimentations « bunker ». Ces valeurs sont directement liées à la qualité de l'opération de filtrage (choix de la portion de courbe étudiée), toujours effectuée par le même opérateur.

Si l'on intègre tour à tour (par exemple sur l'intervalle [0,100] ms) le signal mesuré, le signal filtré et la fonction d'approximation, puis si on compare les courbes obtenues, l'écart est très faible entre les différentes valeurs de l'impulsion, quel que soit t. Cet écart est inférieur à 1 % et les coefficients de corrélations par rapport à l'intégrale du signal mesuré présentent des valeurs comprises entre 0,96 et 0,99. Plus précisément, on propose finalement de retenir, sur la gamme de taux de chargement en explosif étudiée, une loi exponentielle croissante simple dont la forme générique est la suivante :

$$\Delta P_{\text{exp}}(t) = \chi \cdot Q_{\text{ex}} \cdot \frac{m_{\text{ex}}}{V} \cdot \left(1 - \exp\left(\frac{-t}{\alpha_{\text{exp}} \cdot F \cdot V^{1/3}}\right) \right)$$

Avec :

- χ compris entre 0 et 1, traduisant la capacité du processus à libérer la totalité de l'énergie disponible.
- α , le coefficient caractéristique d'un explosif donné, en s/m.
- F un facteur de forme liée à la géométrie interne du volume V. F est sans dimension, strictement positif et permet de retranscrire l'influence de cette géométrie sur le temps de montée par rapport à un cas de référence.

Pour modéliser les expériences décrites dans ce mémoire, on applique cette formulation aux deux explosifs étudiés :

$$\Delta P_{\text{exp},V401} = P_{qst,V401} \left[1 - \exp\left(\frac{-t}{\tau_{m,V401}}\right) \right]$$

$$\Delta P_{\text{exp},TNT} = P_{qst,TNT} \left[1 - \exp\left(\frac{-t}{\tau_{m,TNT}}\right) \right]$$

Les valeurs de P_{qst} et de A déterminées grâce aux expériences réalisées au CEA Gramat sont prises comme référence. On ne cherche pas à généraliser notre formulation en déterminant les valeurs de χ et de F pour chaque type d'enceinte de confinement. Même si nos résultats ainsi que les données de la littérature montrent une influence directe de la forme de la chambre sur la montée en pression quasi-statique du milieu, il est en effet nécessaire de réaliser des expérimentations complémentaires afin de quantifier ces deux valeurs.

On retiendra que :

$$\Delta P_{V401} = 31,288 \frac{m_{V401}}{V} \left[1 - \exp\left(\frac{-t}{0,0042 V^{\frac{1}{3}}}\right) \right]$$

$$\Delta P_{TNT} = 43,822 \frac{m_{TNT}}{V} \left[1 - \exp\left(\frac{-t}{0,0031 V^{\frac{1}{3}}}\right) \right]$$

On cherche maintenant à satisfaire la condition :

$$\Delta P_{\text{exp},V401}(t) = \Delta P_{\text{exp},TNT}(t)$$

quel que soit t , afin de déterminer les paramètres.

Ceci revient à trouver deux situations expérimentales analogues pour lesquelles la montée en pression quasi-statique est identique, en utilisant deux explosifs différents. Ce point peut être particulièrement intéressant pour la réalisation future d'expérimentations à petite échelle où, en première approximation, seul l'effet de la surpression sur la quantité de produit chimique éjectée dans l'atmosphère est recherché. Car bien évidemment, l'invariance de $\Delta P(t)$ n'implique pas la l'invariance des effets thermiques induits par la détonation de la charge explosive.

Afin de satisfaire l'équation ci-dessus quel que soit t sur notre intervalle d'étude, deux conditions sont nécessaires et suffisantes :

$$31,288 \frac{m_{V401}}{V_{V401}} = 43,822 \frac{m_{TNT}}{V_{TNT}}$$

Et

$$\left(\frac{42}{31}\right)^3 = \frac{V_{TNT}}{V_{V401}}$$

Par exemple, la montée en pression quasi-statique induite par la détonation de 100 kg de TNT dans 1000 m³ peut être reproduite, dans le cadre des approximations que nous avons listées, par la détonation de 56,3 kg de V401 dans 402 m³.

Dans le cas où $V_{V401} = V_{TNT}$, c'est-à-dire si l'on souhaite atteindre une pression quasi-statique identique, on obtient une seule relation sur les masses d'explosifs :

$$m_{V401} = \frac{43,822}{31,288} m_{TNT}$$

soit encore

$$m_{V401} \cong 1,4 m_{TNT}$$

Comme nous l'avons précisé, ces derniers développements ne concernent que l'évolution en pression du système. Comme nous l'avons vu, le champ de température interne au volume V est directement fonction de la composition chimique de l'explosif. Au sein d'une même famille d'explosif, les comportements « thermiques » peuvent être drastiquement différents.

Dans le chapitre qui suit, on va tenter d'apporter quelques précisions quant à l'évolution temporelle de la température au sein du volume d'étude, en étoffant les constatations expérimentales déjà effectuées par l'analyse des enregistrements vidéo numériques rapides.

II.2.4 Analyse des enregistrements vidéo numériques rapides et discussion sur l'évolution temporelle du champ de température interne.

On termine ce chapitre II.2 par l'étude de la luminance collectée (L) par les caméras vidéo numériques rapides lors des expériences « bunker », afin de corréliser les résultats précédents et de proposer in fine une modélisation simple du champ de température interne après l'explosion.

Comme nous l'avons décrit de manière détaillée en annexe B, l'utilisation de ces moyens d'enregistrements permet, si l'on conserve sur l'ensemble des essais la cadence d'acquisition, la résolution spatiale du système optique centré, le temps de pose, et le champ total observé, de capturer le flux lumineux émis dans le spectre visible par les produits de détonation en expansion et en combustion avec l'air ambiant, et de comparer les niveaux et durées de ce phénomène optique selon le type et la masse d'explosif employé.

Le spectre d'analyse dépend bien évidemment de la bande passante des capteurs de la caméra utilisée. Les caméras Photron « couleur » enregistrent l'information lumineuse sur trois domaines Rouge, Bleu et Vert. Les filtres numériques sont de type « passe-bande », la fonction de transfert ayant une forme gaussienne. Le système optique centré placé devant le capteur, ainsi que les hublots de qualité optique (mis en place sur une paroi du bunker, figure II.57) filtrent le rayonnement infrarouge et proche infrarouge, qui pourrait perturber les capteurs numériques. Le flux lumineux enregistré correspond donc rigoureusement à une sous-partie du spectre visible.

La visualisation au travers d'un hublot permet au final d'assurer la constance d'une expérience à l'autre du champ de vision et de découpler mécaniquement la chambre de détonation du système optique. La figure II.58 est un exemple d'une série d'images obtenues à une cadence de 30000 i/s lors de la détonation d'une charge de V401 dans le bunker.

De ces images, on peut extraire la variation du flux lumineux moyen, sur l'ensemble du domaine ou sur une zone sélectionnée. Ces opérations de post-traitement sont également détaillées en annexe B. La figure II.59 montre un résultat type obtenu après traitement des images : il est

possible de tracer une « cartographie » du flux lumineux émis par les gaz chauds. Sur cette figure on retrouve en abscisse les numéros des pixels horizontaux de la matrice numérique. En ordonnées il s'agit du numéro de l'image traitée. Cette ordonnée revient donc à une ordonnée temporelle. L'échelle des couleurs est représentative du niveau de flux collecté par chaque colonne de pixels (le rouge correspond à un niveau élevé, le bleu à un niveau faible).



Figure II.57 Gauche : caméra VNUR Couleur en position pour enregistrement de L au travers d'un hublot en verre – Droite : exemple d'image enregistrée à une cadence de 30000 i/s pour une résolution de 256 x 128 pixels

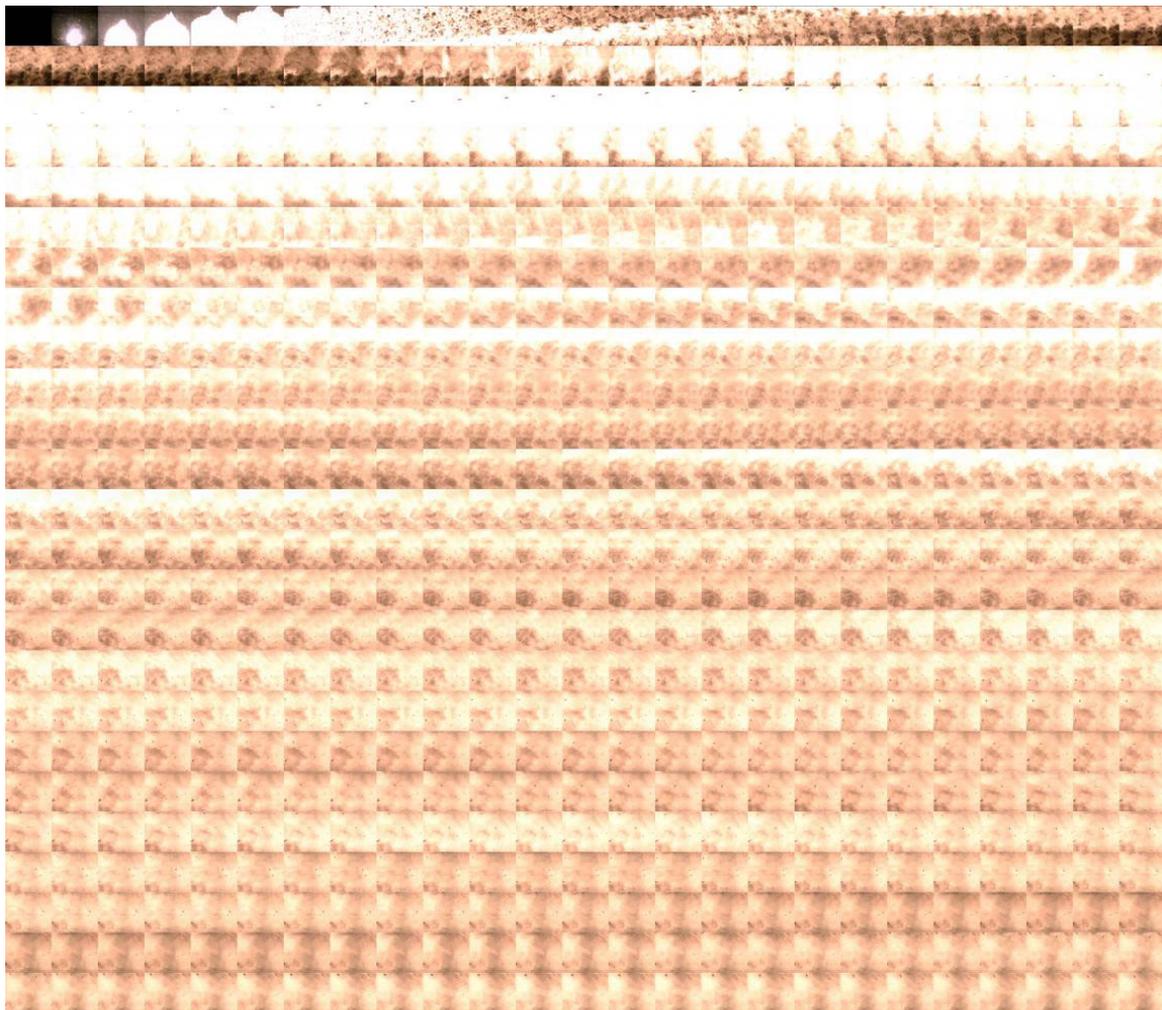


Figure II.58 Extraction d'un enregistrement vidéo ultrarapide du développement des DP au sein du bunker – on remarquera la saturation des capteurs sur les 5 images suivant la mise à feu de la charge

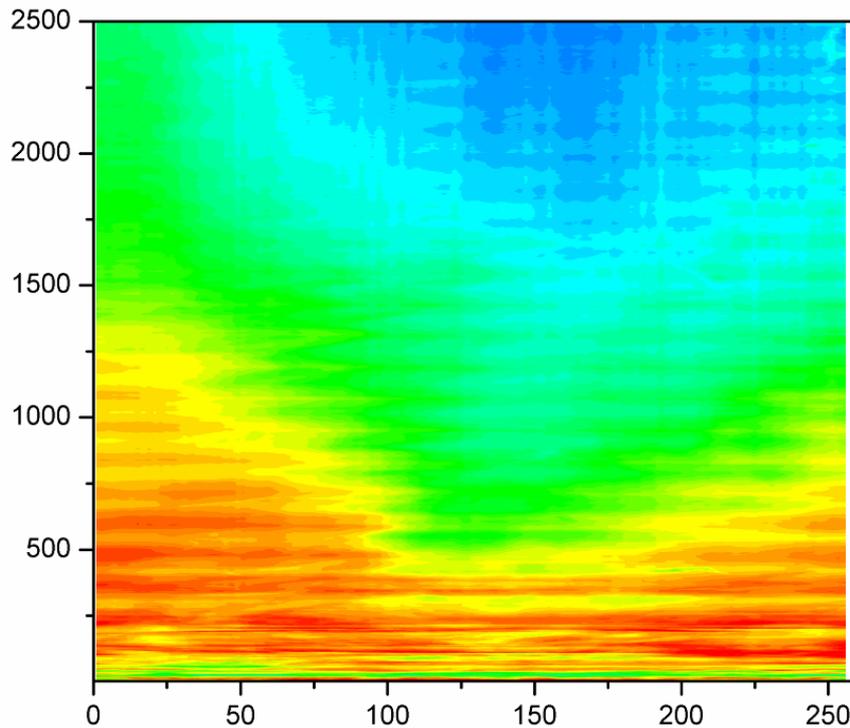


Figure II.59 Diagramme de l'évolution temporelle de la luminosité émise selon l'abscisse d'observation en pixel

Au final, on peut tracer un réseau de courbes (figures II.60 à II.62) représentatives de $L(t)$ en fonction des paramètres de l'essai. Sur la figure II.60, le flux collecté est donnée en niveau N : les images sont en effet codées selon le nombre de bits disponibles, 8 dans ce cas précis. La pleine échelle correspondant à l'étendue dynamique du flux collecté est discrétisée en 256 niveaux. Le niveau 256 correspond à une saturation du capteur de la caméra. La courbe bleue traduit l'évolution moyenne du flux sur l'ensemble de la matrice en fonction du temps. Il faut également préciser que, quel que soit l'explosif utilisé, les cinq premières images sont systématiquement saturées : le rayonnement blanc intense enregistré correspond à l'ionisation de l'air lors de la transmission du choc à la surface de l'explosif.

En appliquant après chaque expérience le même traitement, il est possible de comparer directement le flux lumineux visible engendré selon les caractéristiques initiales de la charge. La figure II.61 est un premier exemple de comparaison. Sur cette figure apparaissent trois courbes relatives respectivement à la détonation d'une charge de 100 g de TNT (en rouge), de 100 g de V401 (bleu clair) et de 150 g de V401 (bleu foncé). La figure II.62 en est un zoom sur les 10 premières ms suivant la détonation de la charge.

On constate que :

- Le signal relatif au TNT est saturé (niveau 256) sur 20 ms. Ce fait résulte d'un compromis sur les paramètres de réglage de la caméra et montre une limite de ce type d'analyse. En effet, afin de pouvoir comparer les résultats relatifs au V401 entre eux et par rapport au TNT, les paramètres de réglages doivent être constants et conférer au système une sensibilité suffisante pour détecter les flux émis par des faibles masses, puis aux temps longs (de l'ordre de 100 ms).

- On note toutefois que sur l'intervalle $[0, 90]$ ms, le flux émis par une charge de TNT est supérieur à celui émis par une charge de V401 de même masse. Une charge de 150 g de V401 émet également moins de flux qu'une charge de 100 g de TNT.

Ces premières observations sont cohérentes avec nos conclusions précédentes : le TNT montre une capacité à engendrer des phénomènes lumino-thermiques supérieure à celle du V401. Ce comportement est directement lié à la composition des produits de détonation du TNT et de leurs réactions aérobies. L'origine du rayonnement dans le spectre visible sera discutée plus loin dans cette section.

- Pour un explosif donné, le niveau de flux collecté, une fois la boule de feu développée, dépend de la masse d'explosif. Le signal relatif à une charge de 100 g de V401 reste, quel que soit $t > 0,5$ ms, inférieur à celui relatif à une charge de 150 g de V401.

En effet, compte tenu du phénomène d'ionisation de l'air, et de la variation de la surface d'émission du flux lors des premiers instants, due à la variation du rayon de la boule de feu que nous avons quantifiée par ailleurs grâce aux expériences DCL, on occulte volontairement de l'analyse les 10 premières images. Dans cet intervalle de temps, le niveau de flux est proche de 256 quel que soit l'explosif.

Autrement dit, cette constatation montre que sur la gamme de taux de chargement étudiée, contrairement au temps de montée en pression, la durée des phénomènes lumino-thermiques dépend de la masse des réactifs en présence.

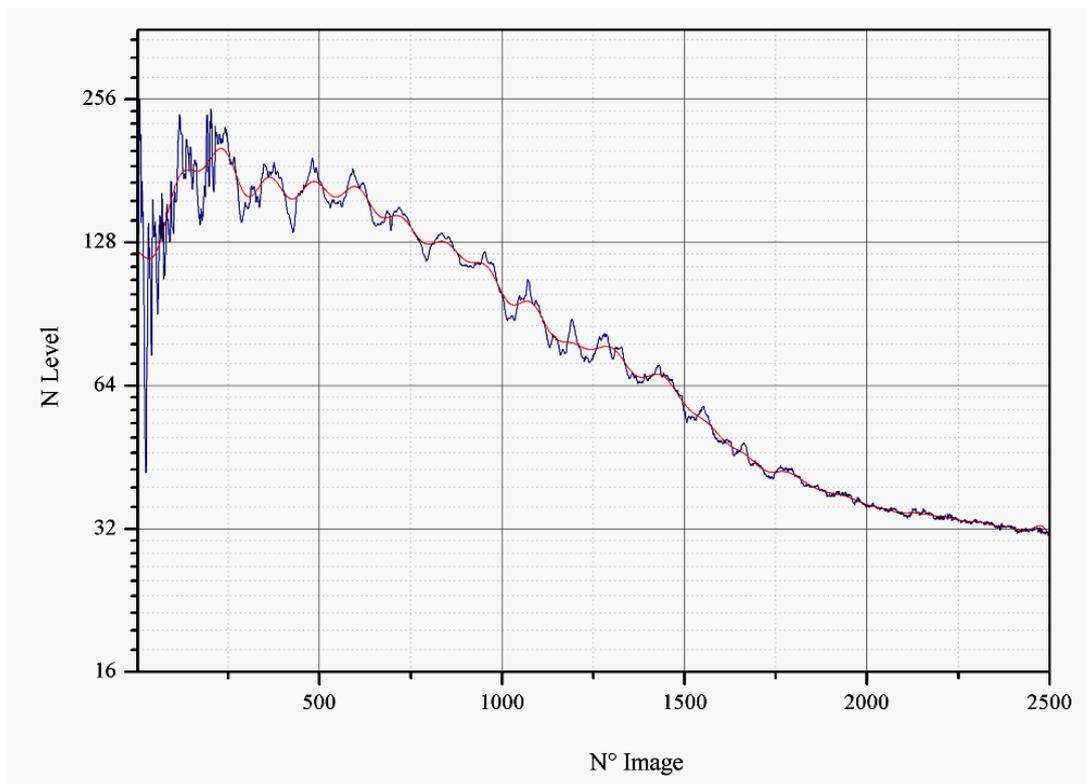


Figure II.60 Exemple de courbe de variation de L, obtenue sur l'ensemble du domaine observé – en rouge, courbe résultant de l'opération de lissage

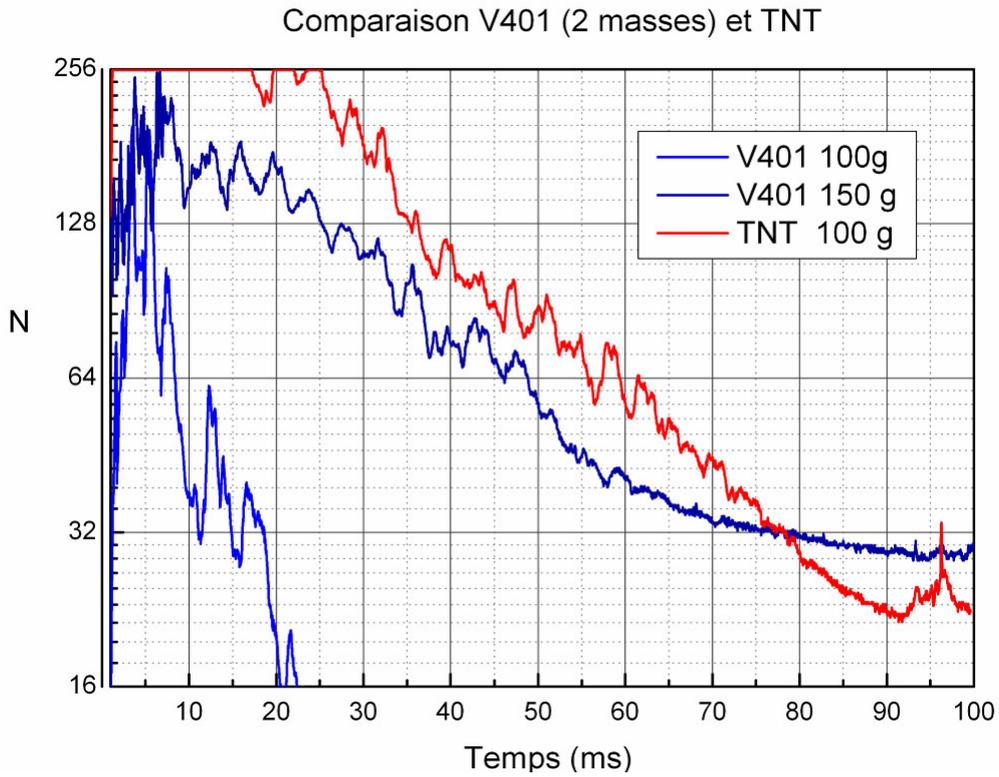


Figure II.61 Comparaison des résultats de $L(t)$ pour trois charges explosives distinctes

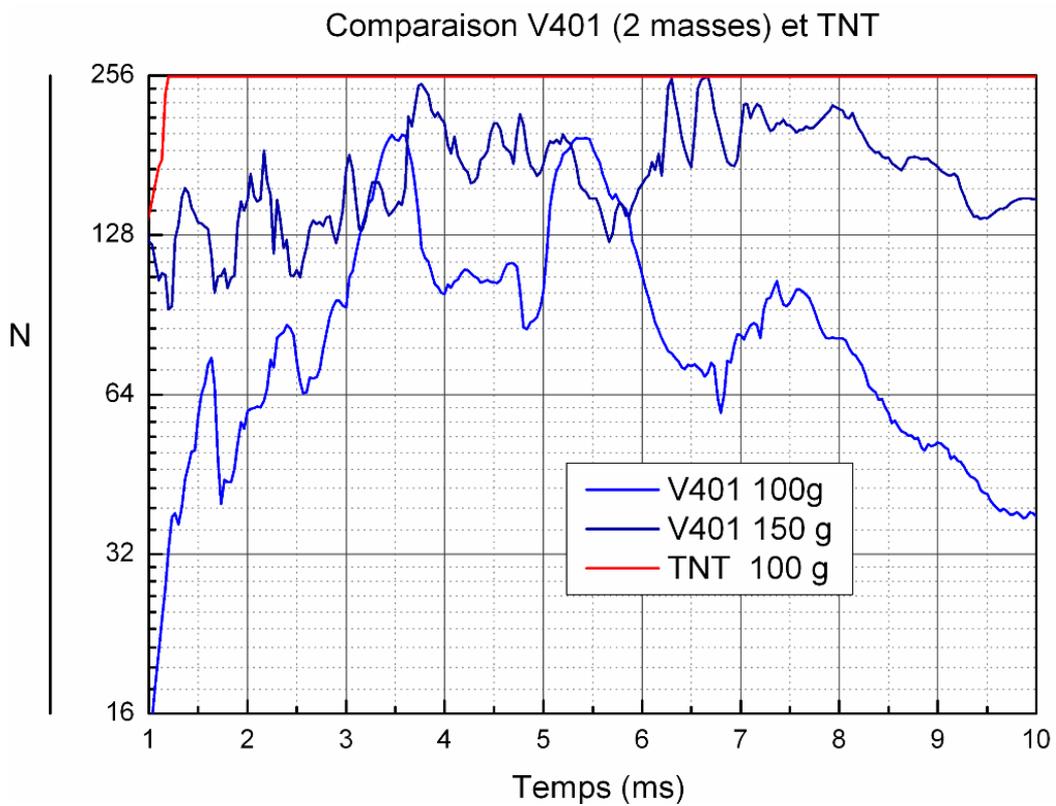


Figure II.62 Comparaison des résultats de $L(t)$ pour trois charges explosives distinctes – zoom sur 10 ms

A l'image des traitements effectués sur les signaux de surpression, il est possible d'extraire d'une telle courbe une composante continue, caractéristique de la variation temporelle à basse fréquence du flux lumineux.

Sur la figure II.60, la courbe rouge correspond à l'application d'un filtre passe bas à la courbe initiale (en bleu). La fréquence de coupure est à nouveau de l'ordre de 200 Hz.

Les courbes filtrées peuvent être modélisées par des lois dites de « Pulse » avec une bonne approximation (figure II.63). Ces lois sont du type :

$$N = A \left[1 - \exp\left(\frac{-t}{\tau_1}\right) \right] \exp\left(\frac{-t}{\tau_2}\right)$$

Avec A, τ_1 et τ_2 des constantes positives.

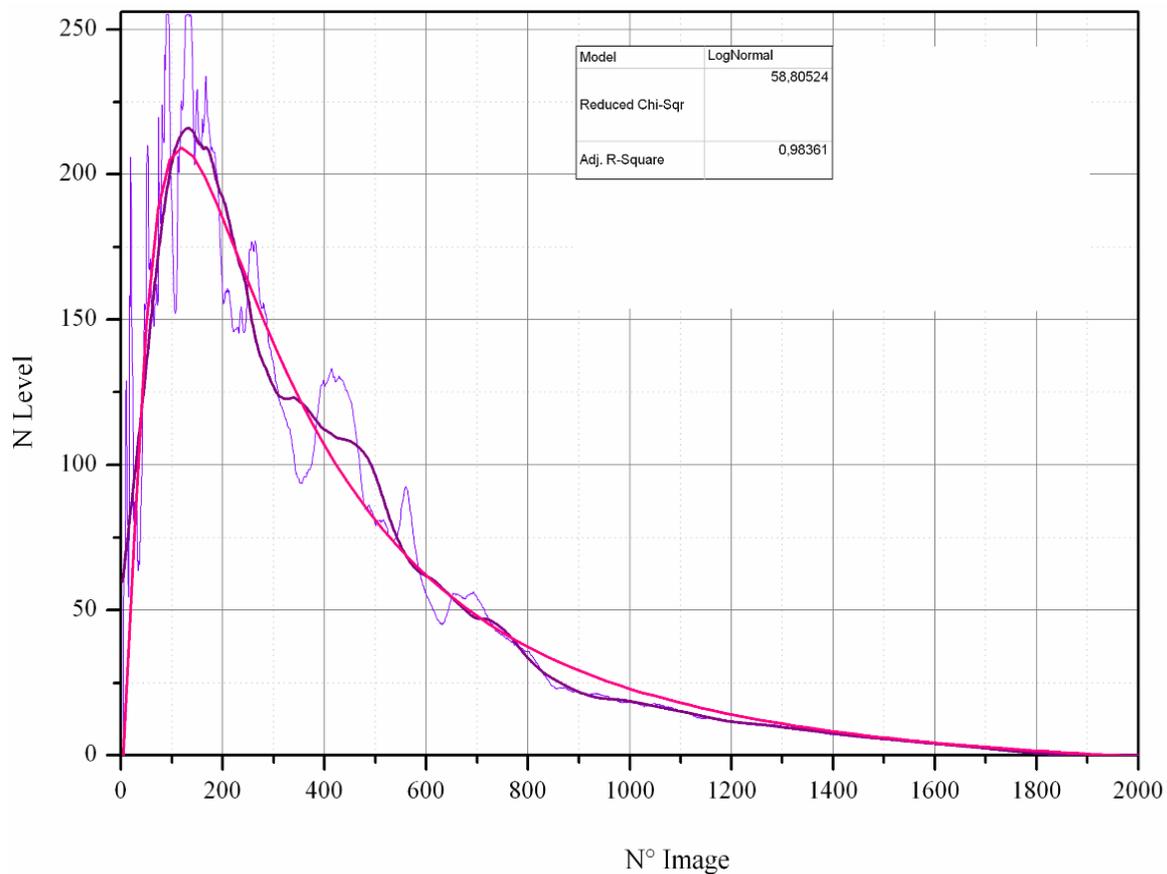


Figure II.63 Approximation de L(t) par une fonction exponentielle de type « Pulse »

Pour chaque expérience, on réalise cette opération sur :

- la courbe moyenne obtenue en prenant en compte l'ensemble du champ optique,
- une courbe obtenue en ne sélectionnant que la partie gauche du champ optique,
- une courbe obtenue en ne sélectionnant que la partie droite du champ optique.

Ces trois opérations sont nécessaires afin de s'assurer qu'il n'y a pas de perte (ou de surabondance) d'informations selon la taille du champ d'observation et afin de confirmer la symétrie physique du phénomène.

Les courbes dites de « Pulse » ont des coefficients de corrélations R^2 compris entre 0,81 et 0,91 par rapport à la courbe initiale. A paramètres constants, les courbes issues du traitement des images montrent le caractère reproductible des expériences bien que les courbes obtenues montrent des écarts relatifs maximaux de l'ordre de 20 %. On constate sans surprise que le flux lumineux émis est plus sensible aux conditions expérimentales que les variations de pression interne.

Les figures II.64 à II.67 illustrent le procédé de traitement des courbes mesurées pour deux expériences mettant en œuvre respectivement 150g (courbes rouge) et 100 g (courbes orange) de V401 :

- La figure II.64 montre les courbes obtenues après application du filtre passe bas,
- Les figures suivantes montrent les résultats des opérations d'approximation par les fonctions de « pulse », sur une échelle de niveaux N de 1 à 256. L'intervalle de temps est pour chaque courbe $[0,100]$ ms,
- La figure II.67 montre finalement ces mêmes courbes sur une échelle de niveaux réduite, en divisant la valeur de N par N_{\max} , N_{\max} étant la valeur maximale atteinte par la courbe d'approximation.

Ce dernier graphique permet de montrer que la durée du pulse (temps durant lequel la luminance reste à un niveau supérieur à 10% de la pleine échelle) est une fonction croissante de la masse d'explosif. Cette figure confirme également que le temps t pour lequel N passe par son maximum semble dépendre également de la masse d'explosif. Toutefois, cette affirmation doit être confirmée par la réalisation d'expériences mettant en œuvre des masses d'explosif différentes. De plus, les différences constatées doivent être validées par l'optimisation de la méthode de post-traitement des signaux de mesure, afin de pouvoir déterminer les intervalles de confiance de notre méthode.

L'analyse fréquentielle des courbes obtenues est également riche en information. On remarque que le signal affiche une forte innovation temporelle : des variations fortes, de grandes amplitudes, correspondent en début d'enregistrement à une élévation rapide de la composante basse fréquence du signal. Le flux collecté diminue ensuite lentement et témoigne de variations de faibles amplitudes et de fréquences plus faibles. Les fréquences caractéristiques du signal, calculées par transformée de Fourier, sont cohérentes avec celles obtenues à partir des signaux de surpression interne. Comme nous l'avions formulé, la propagation des chocs dans le mélange est directement visualisable et est couplée à l'augmentation locale de la température.

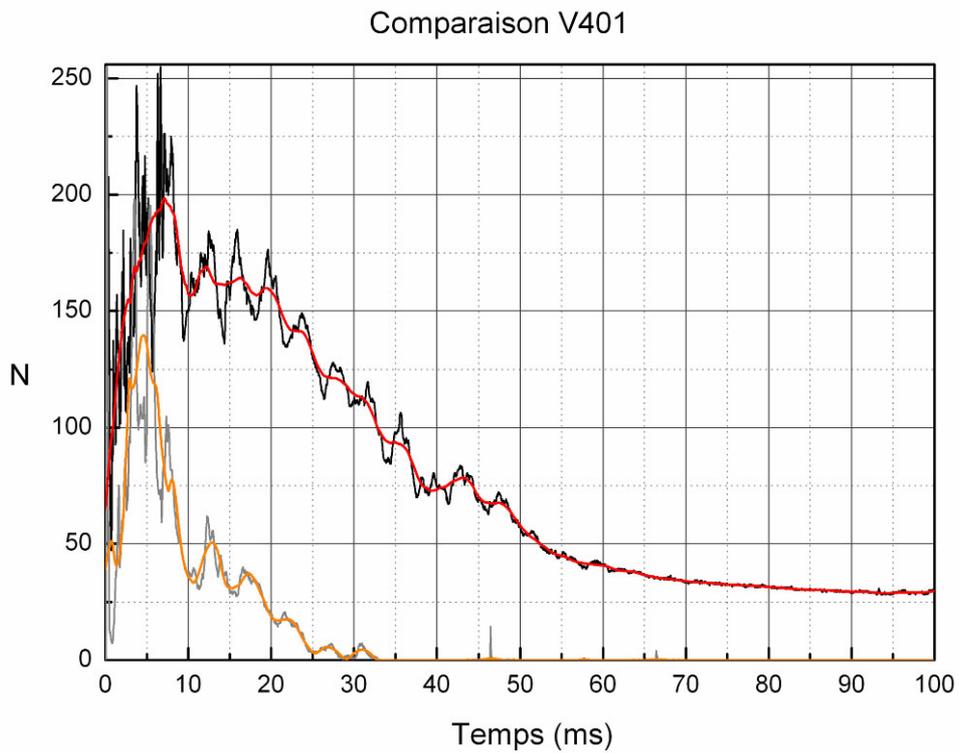


Figure II.64 Application d'un filtre passe bas (f_c de 200 Hz) aux signaux de luminance pour déterminer la composante continue basse fréquence

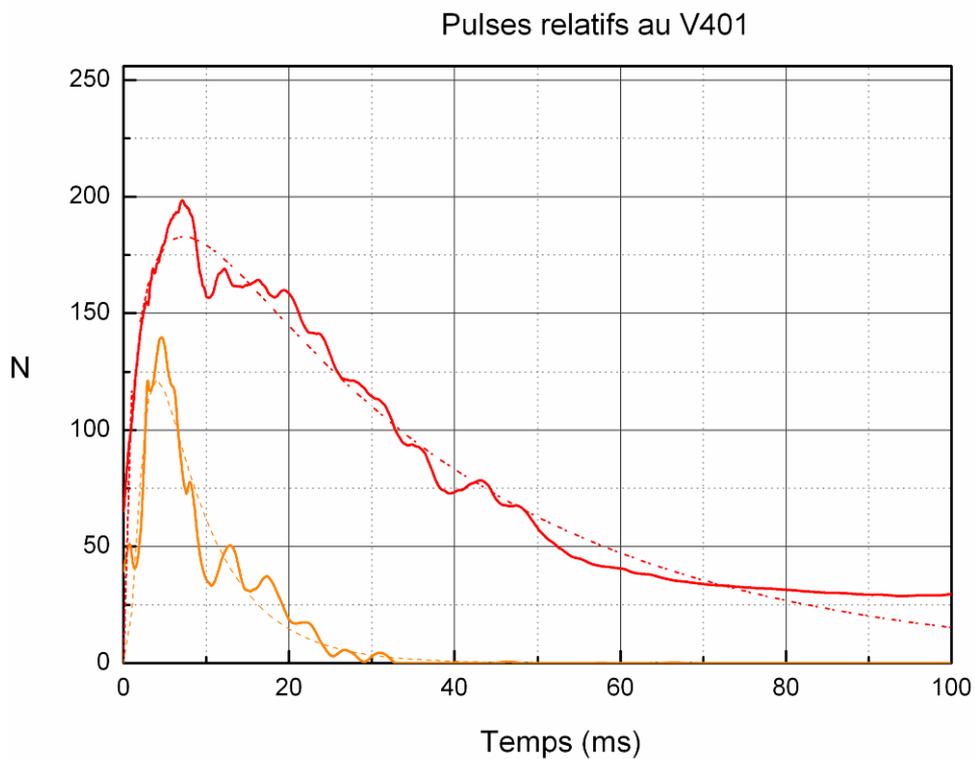


Figure II.65 Détermination des fonctions de type Pulse approchantes sur l'intervalle [0,100] ms

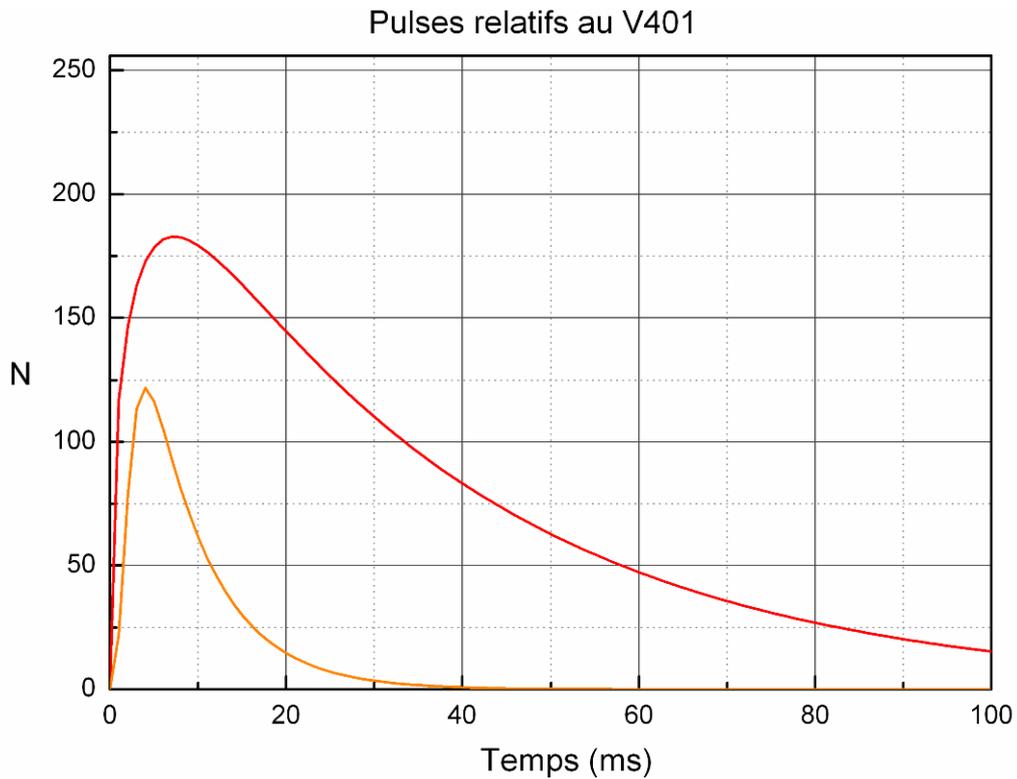


Figure II.66 Comparaison des fonctions de pulse obtenues pour 150 g de V401 en rouge, et 100 g de V401, en orange

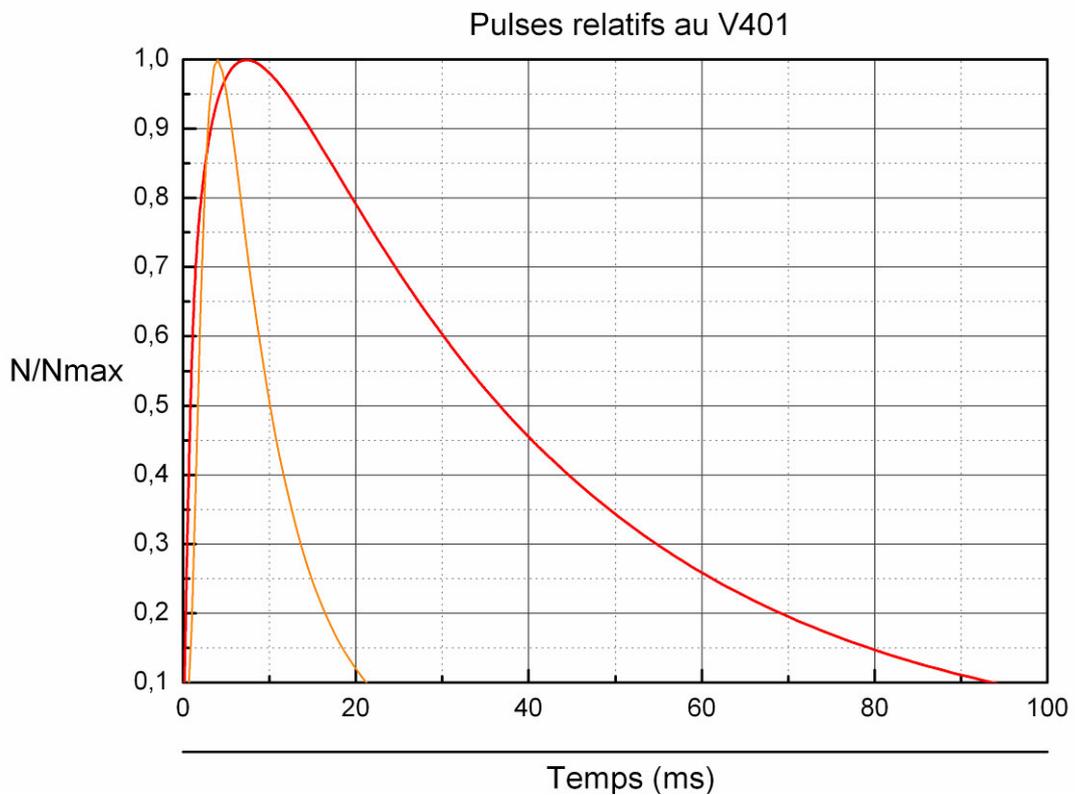


Figure II.67 Comparaison des fonctions de pulse obtenues pour 150 g de V401 en rouge, et 100 g de V401, en orange – l'échelle des ordonnées est réduite par N_{\max}

En comparant sur un même graphique (figures II.68 et 69) un signal de surpression interne et les variations temporelles de luminance spectrale émise par les gaz chauds, on constate les éléments remarquables suivants :

- La phase de haute intensité en luminance (entre 0 et 9 ms sur cet exemple) correspond à la phase de montée en pression quasi-statique du milieu.
- Lorsque la surpression interne atteint P_{qst} (i.e le signal affiche un plateau), la luminance décroît progressivement.
- Sur cet exemple, le niveau de luminance atteint 20 % de la pleine échelle après 80 ms d'enregistrement. A ce même instant, la pression quasi-statique se maintient toujours à P_{qst} .

On vérifie ainsi qu'il y a une évidente corrélation entre les phénomènes lumino-thermiques et la montée en pression quasi-statique du milieu due à la combustion secondaire des DP et aux mélanges turbulents des espèces présentes.

Rq : Sur ces deux graphiques l'origine des temps correspond au fonctionnement du système d'amorçage. La luminance émise est immédiatement détectable à un niveau élevé. La première variation de pression est naturellement liée à l'arrivée de l'onde de choc incidente au niveau du capteur pariétal.

Ce constat valide notre approche jusqu'ici développée. Les fonctions de « pulse » illustrent, à nouveau, la possibilité de réduire les effets d'une explosion interne à un ensemble de fonctions OD(t) simples. Les résultats issus de cette méthode d'observation permettent de mieux comprendre l'évolution du système et peuvent être corrélés avec les signaux de surpression interne. La nature des données collectées ne permet toutefois pas de remonter à la température du milieu observé.

En effet, dans un milieu réactif tel qu'un volume de produits de détonation en expansion, comme dans les phénomènes de combustion, les espèces gazeuses ou solides présentes émettent un rayonnement spectral. Dans le cas particulier de l'émission radiative des espèces gazeuses, l'émission est un phénomène localisé sur des bandes de longueurs d'ondes souvent étroites. Cette émission caractéristique est composée d'une multitude de raies dépendant de la distribution des niveaux rotationnels et vibrationnels liés à la forme, la composition et la température des molécules contribuant au rayonnement observé. Le rayonnement produit par un volume de gaz varie donc en fonction de la température du milieu mais également en fonction de la pression, des concentrations des espèces en présence et de l'épaisseur de gaz observée (profondeur optique).

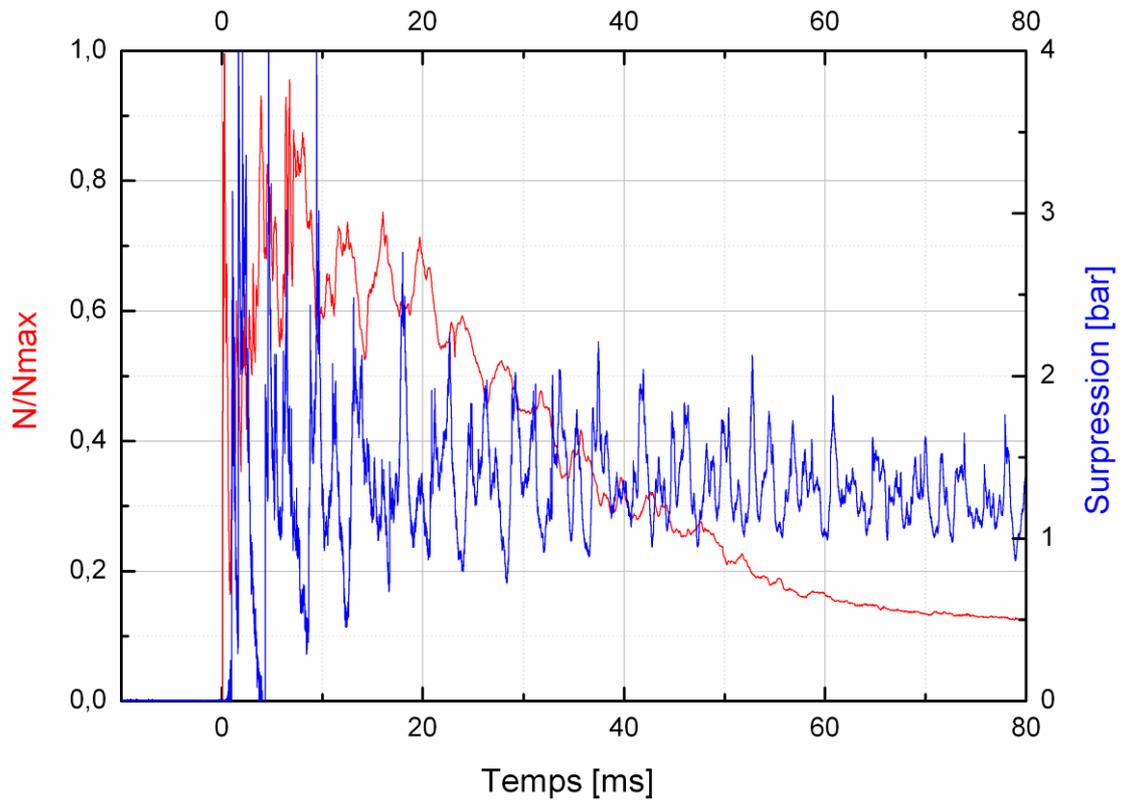


Figure II.68 Comparaison des courbes de luminance et de surpression interne lors de la détonation d'une charge de 150 g d'octoviton dans le bunker.

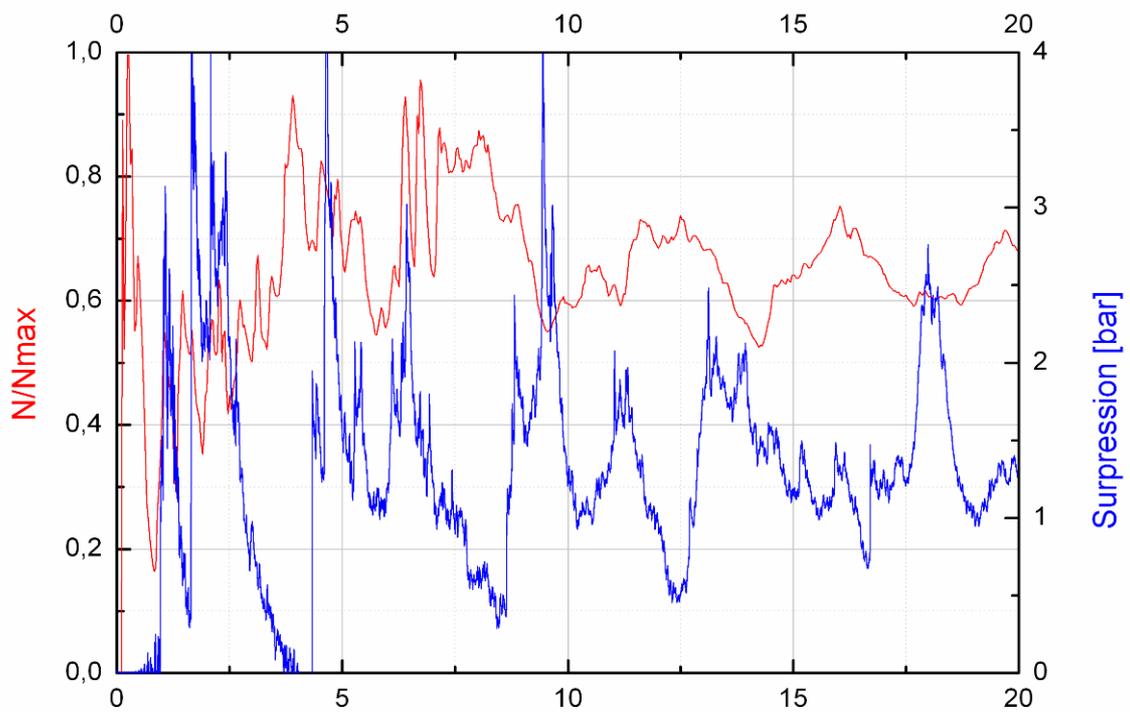


Figure II.69 Comparaison des courbes de luminance et de surpression interne lors de la détonation d'une charge de 150 g d'octoviton dans le bunker – Zoom sur l'intervalle [0,20] ms

Nous avons vu que les espèces gazeuses présentes dans les DP sont, dans un ordre quelconque, H₂O, C, CO, CO₂, NH₃, C₂H₄, CH₄, N₂,... Cette composition dépend de la composition initiale de l'explosif et de l'évolution de leur détente et des réactions aérobies. Dans l'approximation de Born-Oppenheimer, l'énergie totale d'une molécule est la somme des énergies dues :

- à la vibration de la molécule,
- à la rotation de la molécule,
- aux transitions électroniques.

Les transitions internes sans changement de l'état électronique correspondent à des énergies situées dans le domaine de l'infrarouge. Plus précisément, les spectres de rotation pure sont très peu énergétiques et sont situés dans l'infrarouge lointain, les spectres de rotation-vibration se situent dans les domaines proche et moyen infrarouges. Les transitions électroniques impliquent des énergies plus grandes et se traduisent par un rayonnement dans le domaine du visible ou de l'ultraviolet.

Les molécules de H₂ et de N₂ sont des molécules symétriques. Elles n'ont pas de moment dipolaire donc pas de spectre de rotation vibration mais uniquement un spectre électronique situé dans l'UV profond.

Lorsque le nuage de gaz comporte des particules en quantité suffisante, ce qui est le cas par exemple dans les produits de détonation du TNT fortement chargé en particules carbonées, le milieu présente des propriétés radiatives plus complexes, liées aux particules présentes. Quand les particules ont une taille du même ordre de grandeur que la longueur d'onde, la théorie de Mie décrit l'influence des particules sur le rayonnement. Quand les particules sont très petites devant la longueur d'onde, alors la diffusion de Rayleigh pilote le rayonnement du milieu. Pendant les expériences, les particules de carbone par exemple, ont un rayon de l'ordre de 1 μm. Dans ce domaine de taille, on peut considérer que les particules sont en équilibre thermique avec le gaz porteur.

Au final, le rayonnement visible d'un nuage de gaz chauds, partiellement en combustion, et en présence de particules solides est un problème complexe et la conséquence de la superposition de plusieurs sources de rayonnement. Les résultats obtenus ne peuvent être interprétés à la seule lumière des phénomènes de combustion secondaire. Les évolutions couplées des concentrations, de la température et de la pression ne permettent une fois de plus qu'une évaluation globale de l'intensité du phénomène et de l'évolution du système. La luminance émise témoigne cependant d'une température élevée au sein du milieu observé, dans lequel se trouvent des particules de petites tailles en équilibre thermique. La durée de détectabilité du phénomène est donc une signature des effets thermiques de l'explosion.

Plusieurs inconnues sur les milieux observés subsistent mais les travaux de recherche déjà cités entamés en parallèle de notre étude doivent permettre de combler nos lacunes quant à la connaissance des propriétés optiques des produits de détonation. En champ libre, il nous est déjà possible de comparer les durées des phénomènes radiatifs se déroulant dans l'infrarouge et le spectre visible [134].

L'analyse des enregistrements vidéo effectués sous plusieurs angles permet d'aller plus loin dans la description du comportement des gaz chauds. Comme nous l'avons détaillé au chapitre II.2.2.1, dans le cas d'un volume parallélépipédique, la « boule de feu » s'expande principalement selon la longueur du volume. Les réflexions successives des ondes de choc sur les parois engendrent une stagnation des gaz chauds lumineux au centre de V (lorsque la charge est initialement placée au centre de V).

De ces différents constats, mesures et observations, il est possible de proposer de manière schématique une évolution de la température en fonction du temps dans un volume clos suite à la détonation d'une charge explosive. Ces données devront être confirmées et complétées si l'on veut quantifier de manière certaine cette évolution. Des propositions sont effectuées dans ce sens en partie IV.

On suppose l'existence de deux zones, comme nous l'avons déjà formulé, l'une dite « chaude », à une température T_+ , l'autre dite « froide », à une température T_- . Les figures II.70 et II.71 sont des représentations simplifiées de l'évolution des volumes V_+ et V_- , et des niveaux de T_+ et T_- . Sur ces graphiques, on représente les valeurs moyennes de T (en volume) des gaz chauds et des gaz froids si l'on considère qu'il y a une frontière franche entre ces deux milieux. L'abscisse représente l'échelle des temps. Sur la figure II.71, il s'agit d'une échelle logarithmique. Les valeurs des temps sont données à titre d'illustration.

On a défini la zone (ou volume) « froide » comme étant l'ensemble des gaz présents non engagés dans le mélange turbulent avec les produits de détonation, au cours du processus de détente et de combustion secondaire des DP. Suite à la détonation de la charge, les processus de mélange et de combustion entre les produits de détonation et l'air ambiant commencent au cours de la détente des DP (chapitre II.1.1). En configuration sphérique, on rappelle qu'une charge de TNT atteint un rayon stable R_f égal à 23 fois le rayon initial R_0 . Pour une charge de V401, R_f atteint $25R_0$.

Il est possible de décrire l'évolution de T_+ en trois phases distinctes successives:

- tout d'abord, entre t_0 et $t_1 = 0,03.R_0$ s environ, une décroissance moyenne brutale due à la détente des DP, malgré les réactions de combustion pouvant se dérouler au sein du mélange turbulent en périphérie de la boule de feu. Cette décroissance est exponentielle, le rayon de la boule de feu suivant une fonction exponentielle croissante (chapitre II.1.3). La température initiale des DP peut être prise égale à la température d'explosion à volume constant.
- Une phase intermédiaire (entre t_1 et t_2 de l'ordre de 10^{-1} s) pendant laquelle T_+ est constante. T_+ prend des valeurs différentes selon le taux de chargement en explosif, valeurs que nous avons déterminées au chapitre II.2.2.
- Une phase d'homogénéisation en température aux temps longs.

La première phase correspond à l'augmentation de volume de la boule de feu, et donc de V_+ . A la fin de ce processus de détente, les réactions de combustion secondaires sont entretenues et les réflexions d'ondes font varier le volume V_+ autour d'une valeur stable appelée V_f . Réciproquement, V_- chute d'abord rapidement, puis se stabilise après oscillations autour d'une valeur $V - V_f$.

Lors de la phase intermédiaire, on considère la valeur moyenne de la température au sein des gaz chauds comme constante, malgré les variations de volume et la production locale de chaleur par combustion. Cette hypothèse se veut bien évidemment cohérente avec notre démarche d'analyse spectrale des signaux de surpression et la détermination expérimentale des températures.

On considère également que lors de cette même phase, il y a un échauffement progressif des gaz froids par transferts thermiques (essentiellement par rayonnement). Cet échauffement n'est pas quantifiable par nos méthodes d'analyse.

A plus long terme, pour des temps supérieurs à 10^{-1} s, un processus d'équilibrage des températures s'engage par rayonnement, diffusion de chaleur et des espèces dans le volume. Les pertes aux parois participent également à ce processus. Une seconde après la détonation de la charge, l'existence de deux zones clairement distinctes n'est plus envisageable et la température est globalement homogène dans le milieu. Cette dernière continue à chuter à cause des échanges thermiques au niveau des parois du volume.

A titre d'exemple, pour une charge explosive de 100 kg :

- une charge sphérique de TNT atteindra un diamètre maximal de 11 mètres, 7,2 ms après la mise à feu de la charge. Le volume des gaz est alors de 703,3 m³.
- Une charge sphérique de V401 atteindra un diamètre maximal de 11,7 mètres, 7 ms après la mise à feu de la charge. Le volume des gaz est alors de 840 m³.

Pour une masse de 50 kg, ces valeurs sont égales respectivement à 8,76 m après 5,7 ms pour le TNT, 9,3 m après 5,6 ms pour le V401.

Lorsque le volume V est égal à 1000 m³, pour des dimensions $L = 20$ m, $l = 10$ m et $h = 5$ m, les gaz chauds en fin de détente des DP sont répartis sur une longueur de 16 mètres environ lorsque la charge a une masse de 100 kg. Pour un taux de chargement de 0,1 kg/m³, on retiendra que 80 % du volume initial est occupé (à cet instant donné) par les gaz chauds, mélange d'air, de DP et de gaz brûlés.

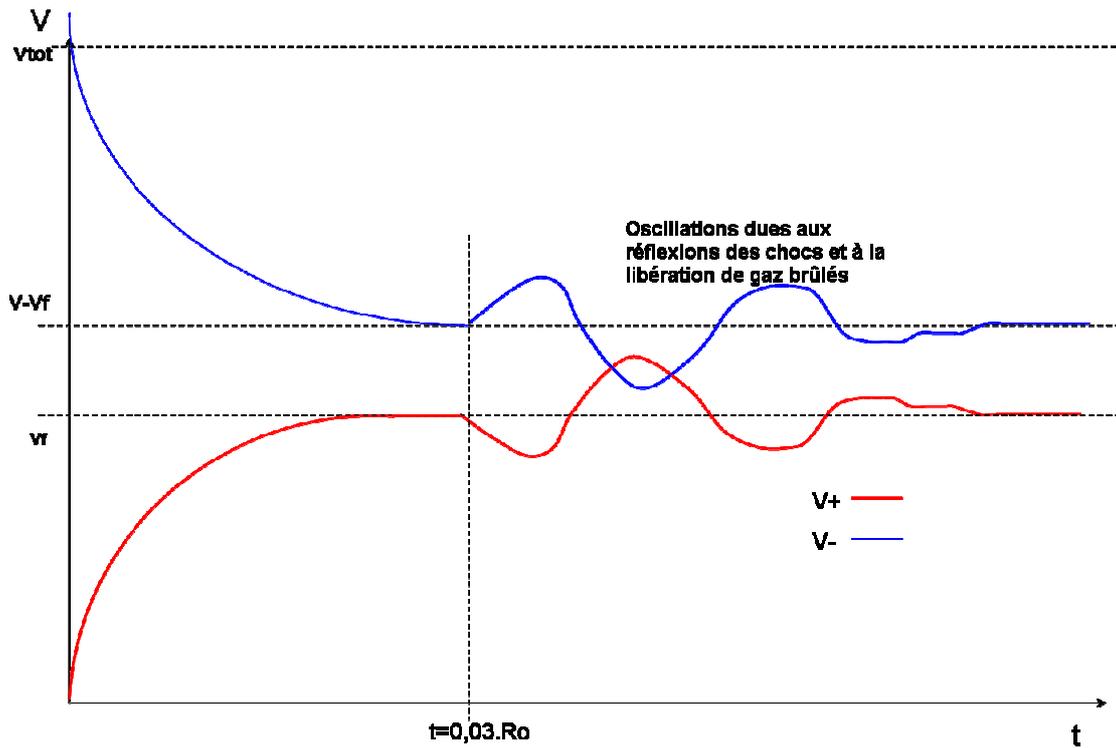


Figure II.70 Représentation schématique de l'évolution des volumes chauds et froids au sein du volume de travail après détonation d'une charge explosive

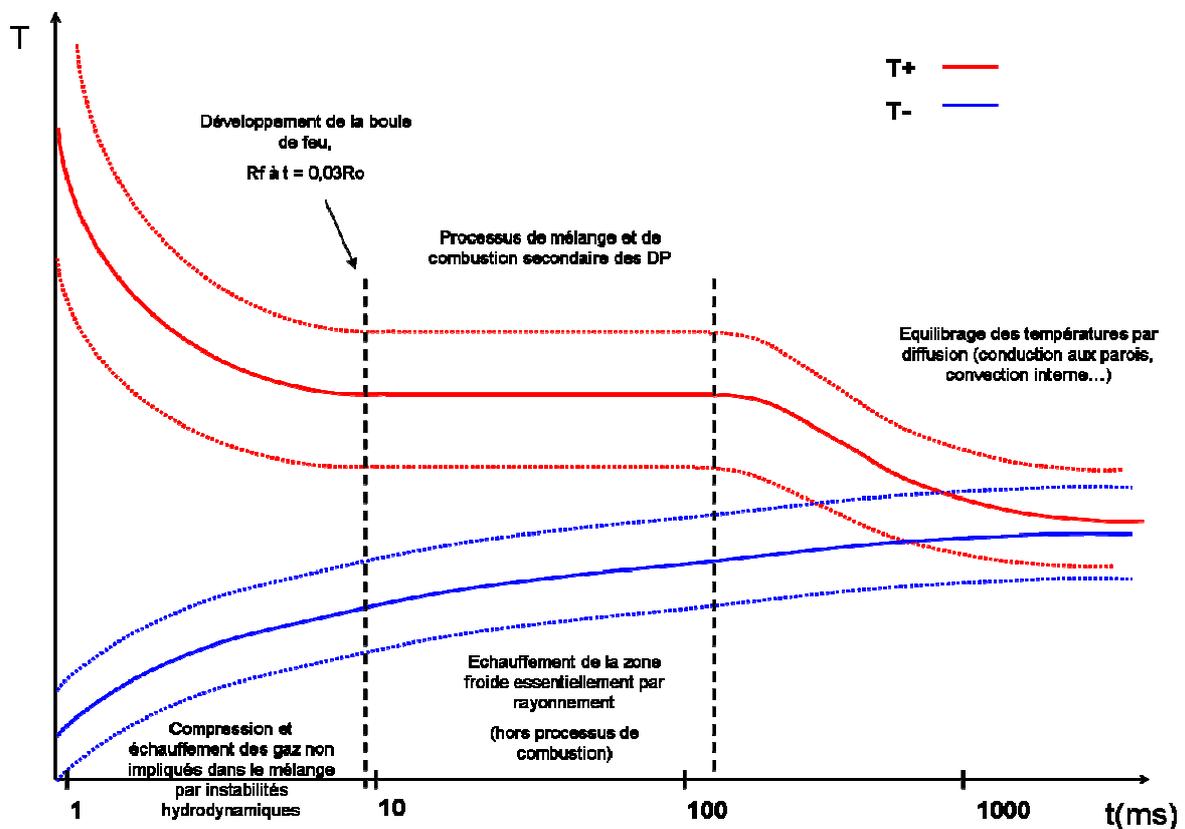


Figure II.71 Représentation schématique de l'évolution des températures chaudes et froides au sein du volume de travail après détonation d'une charge explosive

Pour finir cette section, et afin d'introduire le chapitre suivant, nous allons comparer les courbes de luminance, relatives à la détonation d'une charge de TNT, en présence ou non d'une flaque d'eau répandue initialement sur un tiers de la surface au sol.

Les figures II.72 et II.73 mettent en évidence la forte atténuation des phénomènes lumino-thermiques par la présence d'eau liquide dans le bunker. La présence de la flaque d'eau réduit de 67 % la durée de détectabilité de la luminance.

La figure II.73 est un agrandissement de la figure précédente sur les premiers instants de l'expérience. Dans le cas d'une charge de TNT seule, la courbe de luminance affiche une saturation sur 10 ms. Si de l'eau liquide est présente, la luminance produite par les gaz chauds n'engendre pas de saturation des capteurs numériques. On constate donc que dès les premiers instants (soit 1,5 ms après détonation de la charge), il y a interaction entre les différentes phases présentes.

Ce constat est d'ordre qualitatif. En effet, lorsqu'un liquide est initialement répandu dans le volume, les caractères symétrique et constant du champ de visualisation sont difficilement conservés. La phase liquide éteint, ou limite, les réactions en phase gazeuse de manière hétérogène.

Comparaison TNT et TNT/Eau

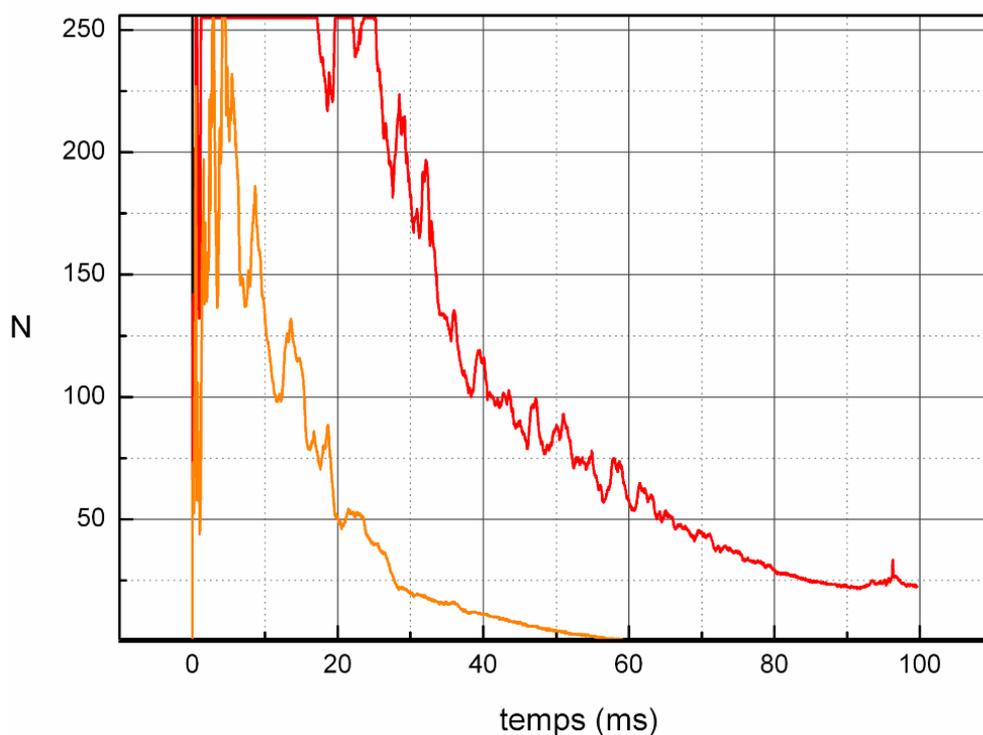


Figure II.72 Comparaison des signaux de luminance enregistrés lors du fonctionnement d'une charge de TNT dans le bunker, en présence ou non d'eau liquide – en orange, eau initialement répandue au sol – en rouge, absence de liquide

Comparaison TNT et TNT/Eau

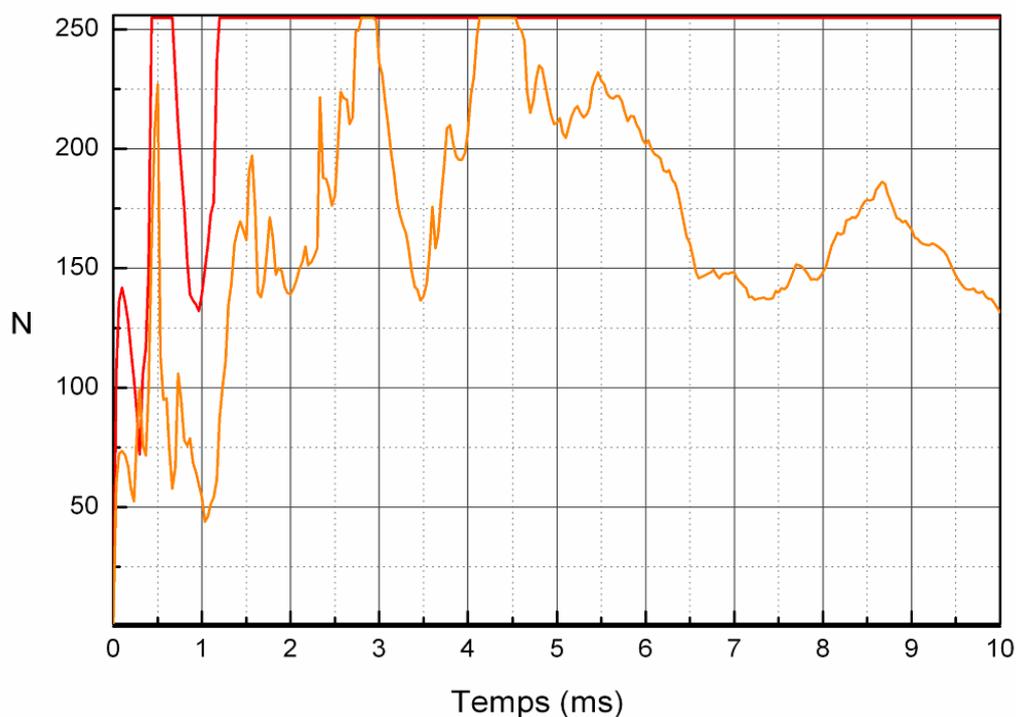


Figure II.73 Comparaison des signaux de luminance enregistrés lors du fonctionnement d'une charge de TNT dans le bunker, en présence ou non d'eau liquide – agrandissement sur l'intervalle [0,10] ms

II.3 Influence de la présence d'un liquide et d'une surface de fuite

Les lois de montées en pression du chapitre précédent sont données, on le rappelle, pour une explosion en volume clos, et lorsque l'oxygène de l'air est en excès. Afin de rapprocher du scénario général de notre étude, on va se pencher plus particulièrement dans cette section sur l'influence sur le champ de pression interne :

- De la présence d'une surface de fuite vers l'extérieur (qui peut être de volume infini ou de volume très supérieur à celui du milieu d'étude).
- De la présence d'un liquide inerte (i.e. seulement capable de s'évaporer) réparti initialement de manière aléatoire ou non dans le volume.

Ce deuxième point nous permettra d'introduire les travaux de modélisation sur l'évaporation d'un liquide de la partie III.

II.3.1 Influence de la présence d'une surface de fuite

Cette surface de fuite S_e , nommée par ailleurs dans le mémoire d'« événement » ou de « brèche » vers l'extérieur, reste très inférieure à la surface totale délimitant le volume V . A ce titre, il n'y a pas de perte massive de matière à travers cette surface due à la propagation des ondes de chocs. Des simulations numériques à l'aide du code EDEN, déjà évoquées au chapitre précédent, ont permis de restituer la chute de pression interne due à la vidange des gaz. La figure II.74 est en est une illustration.

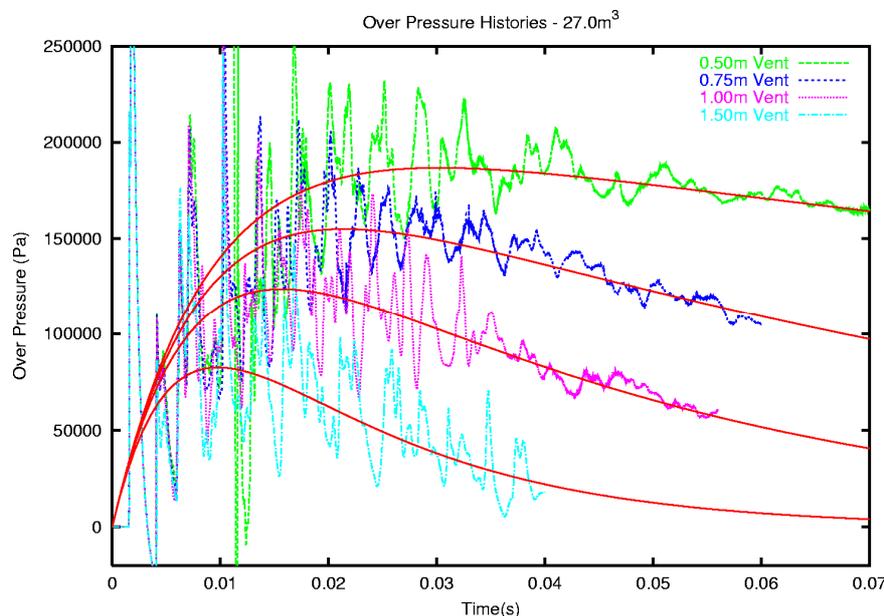


Figure II.74 Simulation numérique à l'aide du code multiphasique EDEN d'une explosion interne en présence d'une surface de fuite.

Dans un esprit constant de chercher à réduire ce problème 3D, il est à nouveau possible de traiter les courbes obtenues et de déterminer un signal continu approchant. Sur la figure II.74 apparaissent en rouge les courbes après traitement pour quatre surfaces de fuite croissantes tous les paramètres étant égaux par ailleurs.

A nouveau, on peut construire une loi simple décrivant le processus compétitif entre la montée en pression due à l'explosion de la charge, et la réduction de pression due à la perte de masse au travers de S_e . On considère à nouveau que la pression est homogène au sein du volume, ce qui revient à dire que la détente s'effectue au travers un faisceau d'ondes acoustiques (i.e. le temps de d'homogénéisation de la pression due au processus de vidange est infiniment court par rapport au temps total nécessaire pour revenir à pression ambiante). On multiplie les lois du chapitre précédent par une fonction de type exponentielle décroissante telle que :

$$\Delta P(t) = P_{qst} \left(1 - \exp\left(\frac{-t}{\tau_m}\right) \right) \exp\left(\frac{-t}{\tau_v}\right)$$

Avec τ_v le temps caractéristique de vidange, qui est en première approximation directement proportionnel à la surface de fuite. Cette dernière affirmation se déduit des résultats expérimentaux et des simulations numériques réalisées.

La figure suivante précise quelques formes typiques de $\Delta P(t)$ selon les valeurs relatives de τ_m et τ_v . Si le temps de vidange est du même ordre de grandeur que le temps de montée en pression alors la pression interne n'atteint jamais la pression quasi-statique. De manière évidente, plus la surface de fuite est faible, plus le temps de vidange est long.

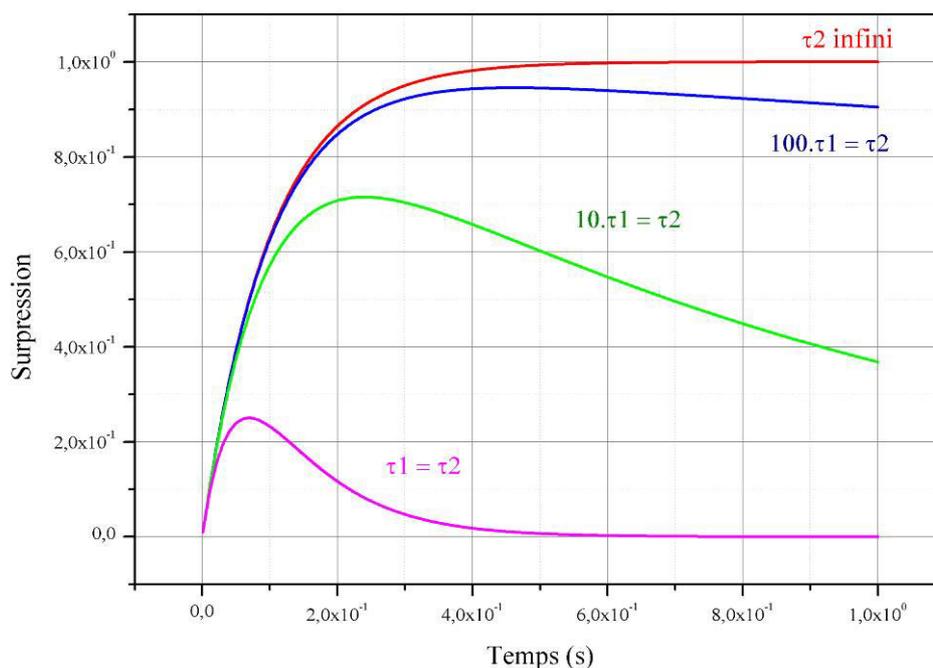


Figure II.75 Formes typiques des signaux de surpression interne après traitement selon les valeurs de T_1 et T_2

On peut ici préciser le domaine d'étude et ce que l'on entend par une surface de fuite de faibles dimensions, en calculant par exemple le ratio : $\frac{S_e}{V^{\frac{1}{3}}}$. Les données d'entrées des simulations EDEN

(volume de 27 m³ pour des surfaces de fuite variant entre 0,19 et 1,767 m²) conduisent à des ratios compris entre 0,065 et 0,59. La surface de fuite reste faible devant la surface totale du volume V ,

mais le dernier cas simulé (diamètre de la brèche de 1,5 m) constitue déjà une situation en dehors de notre champ d'investigation. En effet, lors des expérimentations Bunker, la brèche du toit, lorsqu'elle était ouverte, avait un diamètre constant de 30 mm. Le bunker ayant un volume de $1,875 \text{ m}^3$, on obtient un ratio de 5×10^{-4} . Dans cette configuration, on peut affirmer en première approximation que la surpression interne atteint sa valeur maximale sans être perturbée.

La formule proposée a été partiellement validée grâce à ces expérimentations. Comme le montrent les figures II.76 et II.77, des tirs ont été réalisés avec des charges explosives identiques, brèche ouverte puis brèche fermée.

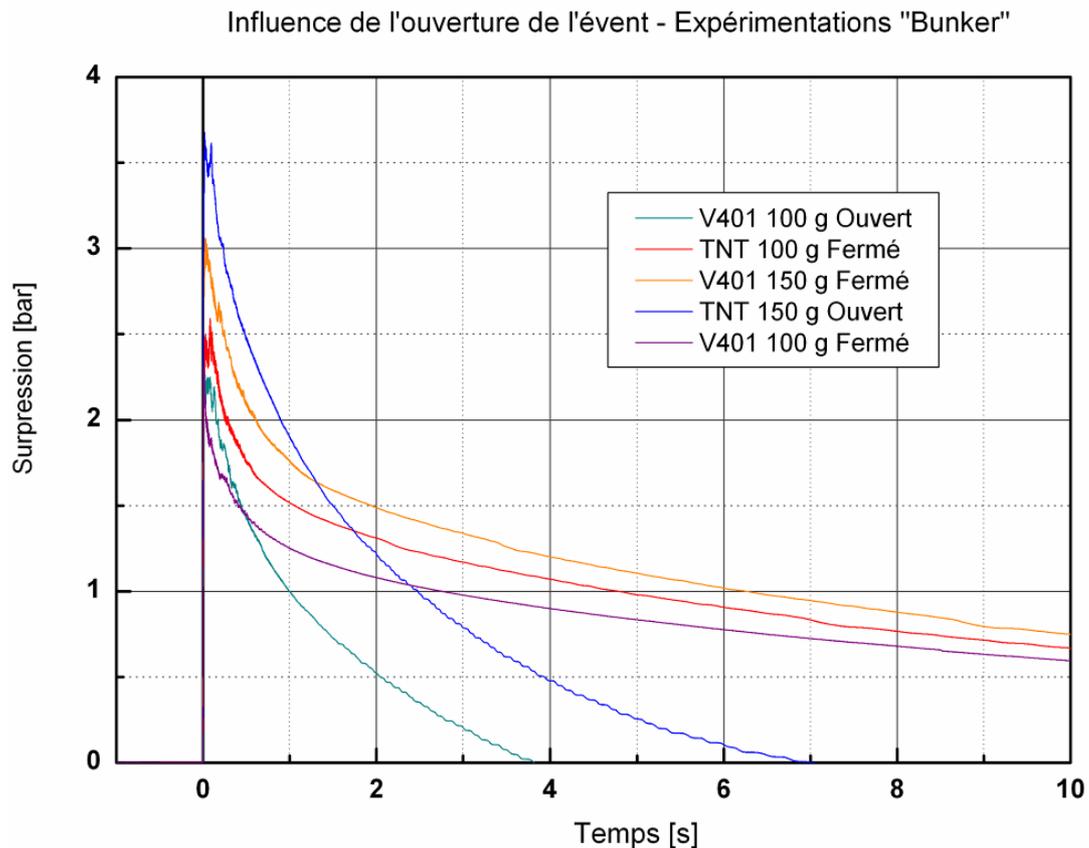


Figure II.76 Courbes de surpression interne au bunker lors d'explosion brèche ouverte puis brèche fermée.

Sur la figure II.76, les courbes bleues correspondent à deux tirs effectués brèche ouverte. La surpression mesurée retourne à une valeur nulle au bout de 4 secondes pour une charge de 100 g de V401, de 7 secondes pour 150 g de TNT. A masse identique, la surpression se maintient à une valeur de l'ordre du bar sur des temps plus longs. Le temps nécessaire à la vidange étant très supérieur au temps de montée, les résultats ne permettent pas de valider le modèle réduit. En effet, malgré le fait que les signaux soient cohérents, ces derniers ne traduisent pas fidèlement, pour des temps de fonctionnement supérieurs à une seconde, le processus compétitif décrit plus haut. Ceci pour deux raisons :

- Tout d'abord, sur cet intervalle de temps, des échanges conductifs aux parois ont eu le temps de s'établir, et la chute de pression interne est due en partie à la chute de température globale du système.

- D'autre part, les capteurs utilisés, qu'ils soient piézoélectriques ou piézo résistifs, ont un temps de décharge inférieur à la seconde, et sont de plus soumis à une dérive thermique. Dès lors, la décroissance affichée est naturellement liée à la fonction de transferts du capteur. Ce comportement intrinsèque à la chaîne de mesure se traduit notamment sur la figure II.76 par des décroissances aux allures en tout point similaires quelle que soit la configuration de l'expérience.

La figure II.77 est un agrandissement de la figure précédente sur la première seconde des expériences. Au-delà des limites que nous venons de citer, ces graphiques permettent d'éclaircir les effets d'une brèche ouverte. On distingue clairement que, quels que soient la masse et le type d'explosif, le plateau de surpression quasi-statique a le temps de s'établir.

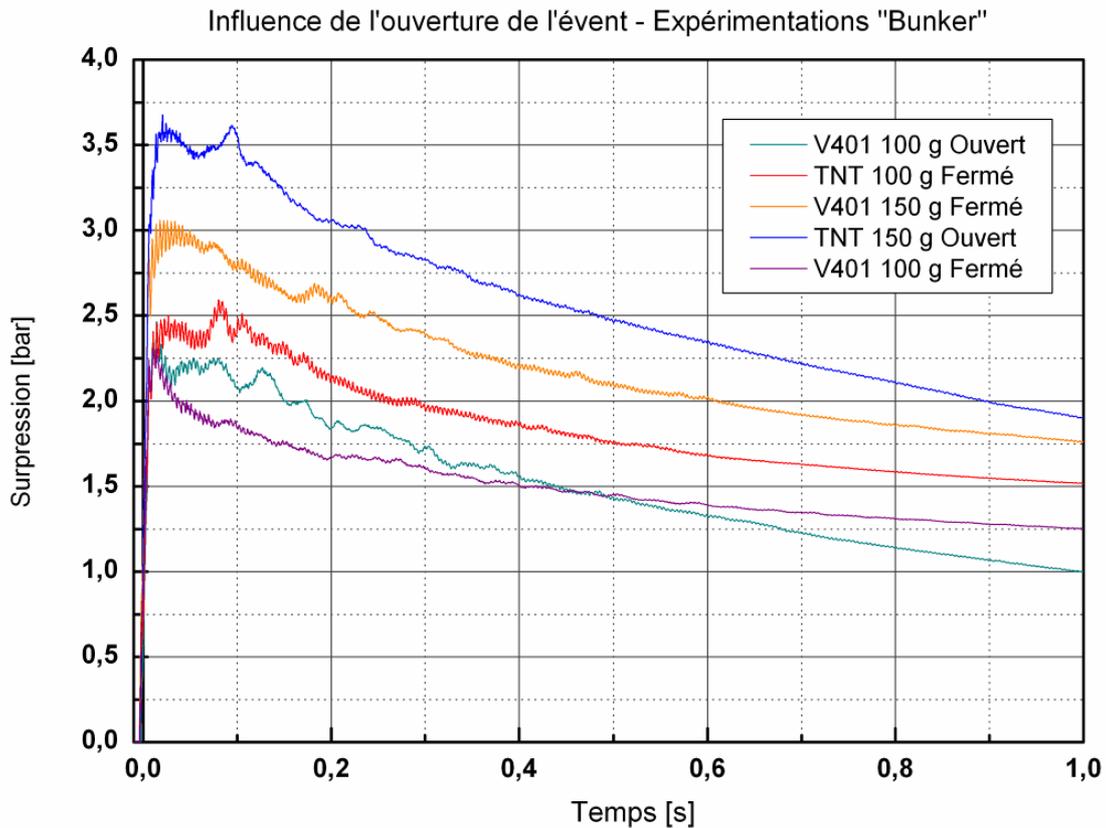


Figure II.77 Courbes de surpression interne au bunker lors d'explosion brèche ouverte puis brèche fermée – zoom sur la première seconde

La présence d'une surface de fuite de faibles dimensions est donc a priori modélisable au travers d'un terme correctif, traduisant la décroissance exponentielle de la surpression interne au volume de travail. Les expérimentations bunker réalisées avec une brèche ouverte au niveau du toit nous permettent de faire les constats suivants, qui nous seront utiles dans la partie III afin de modéliser l'ensemble du processus :

- une ouverture de très faible surface ne perturbe pas de manière significative l'établissement de la pression quasi-statique et le processus de combustion secondaire des produits de détonation de l'explosif.

- L'écoulement à la brèche (débit massique) peut être vu, et donc modélisé, comme un processus de vidange classique d'un réservoir sous pression vers un milieu extérieur à pression ambiante, sans génération de perturbations significatives au sein du réservoir. A tout moment, la pression interne peut être considérée comme homogène.

II.3.2 Influence de la présence initiale de liquide

On va s'intéresser maintenant aux conséquences de la présence initiale de liquide, afin de s'approcher du scénario général d'intérêt. Ce système à volume constant {air + liquide inerte + explosif}, lorsque l'explosif n'est pas en contact direct avec le liquide, a fait l'objet de publications récentes [135 à 138] et de divers travaux expérimentaux ou numériques [139] en dehors du présent contexte.

On peut citer comme principales applications :

- l'extinction par brouillard ou par noyage d'un phénomène réactif brutal de type explosion,
- la limitation des effets terminaux de systèmes d'armes antinavires par l'injection brutale de brouillard à l'intérieur des volumes des bâtiments cibles ou la projection de rideaux d'eau à l'extérieur (système dit de « blast mitigation »: atténuation du souffle interne ou incident issue de la détonation d'une arme).

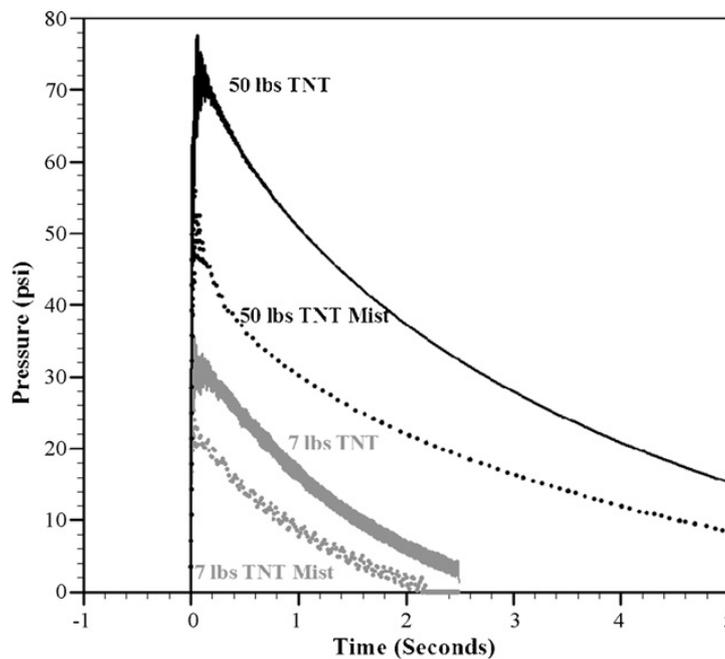


Figure II.78 Résultats extraits de [135], Comparaison de signaux expérimentaux de détonation de charge de TNT en caisson de navire

Les travaux recensés ont alors pour objectifs l'optimisation de dispositif existant, d'un point de vue géométrique ou temporel, ou sur le choix d'un liquide permettant une efficacité certaine. La figure II.78 montre des résultats expérimentaux de mesure de surpression lors de l'explosion de charges de TNT à l'intérieur de caissons représentatifs de tranches d'un navire de combat.

L'intervalle temporel est ici [0,5] secondes. Les courbes en pointillés correspondent aux explosions en présence d'un brouillard d'eau. Les courbes en traits pleins correspondent aux essais avec de l'explosif seul et présentent une forme classique (avec les restrictions que nous avons apportées sur le comportement de capteurs de pression dans un tel environnement). La présence du brouillard, dont la constitution exacte (diamètres des gouttes) n'est pas précisée dans l'article, conduit à une diminution de la surpression mesurée sur toute la durée de l'enregistrement. On constate malgré l'échelle une nette chute de la pression quasi-statique en début d'expérience. La décroissance de pression est dans tous les cas le résultat d'une compétition entre différents phénomènes d'échanges thermiques vers l'extérieur et entre phases.

A partir de ces références bibliographiques, nous avons cherché à simuler expérimentalement des cas simples d'interaction entre une phase liquide et une explosion, afin de détailler ce processus à partir des enregistrements de pression et des enregistrements vidéo numériques rapides. Le premier cas test consiste à répartir une masse m de liquide sous forme de flaque à l'intérieur de l'enceinte. De prime abord, ce cas peut sembler éloigné du scénario principal de notre étude. Ce choix se justifie notamment pour trois raisons :

- le cas d'une flaque répartie sur tout ou partie de la surface au sol est une situation adaptée à notre dispositif expérimental pour visualiser les événements internes au système.
- Contrairement au cas d'un liquide mis en suspension suite à une rupture catastrophique de containers, une partie seulement de la phase liquide est concernée par le processus d'évaporation. Pour une même quantité de liquide, la surface d'échange initiale entre la phase L et les gaz chauds présents est limitée et connue dans le cas de la flaque, alors que, pour un nuage de gouttes, elle augmente rapidement lorsque le diamètre des gouttes diminue. De plus, grâce au dispositif mis en place, on limite les effets des ondes de choc sur la phase liquide même si une fragmentation partielle de la flaque est inévitable.
- De plus, la création d'une flaque au sol suivie d'une explosion interne est un cas limite de notre scénario de départ, pour lequel le délai entre l'ouverture des conteneurs et la survenue d'un événement de type explosion est grand.



Figure II.79 Expérimentations DMC en présence d'eau sous forme de flaque- à gauche, flaque sur 1/3 de la surface au sol du bunker – à droite, bac à l'intérieur de la chambre Athéna

La surface « au sol » du bunker représente 3,125 m². Une flaque de 30 litres d'eau idéalement répartie dans l'enceinte a donc une épaisseur de 9,6 mm. Des quantités de 4, 5 et 12 litres d'eau ont également été réparties sur un tiers de la surface disponible, comme le montre la figure II.79. Ces quantités représentent alors respectivement des flaques de hauteur 3.8, 4.8 et 11.5 mm.

Des expérimentations complémentaires ont été réalisées dans la chambre hermétique Athéna, en disposant l'eau à l'intérieur d'un bac occupant toute la longueur disponible de la chambre.

Les enregistrements vidéo numériques ont permis à des vitesses d'acquisition supérieures à 10000 i/s de visualiser l'interaction de la première onde de choc avec le liquide, puis des produits de détonation avec ce dernier. Tant que la luminosité engendrée par la combustion des DP est suffisante, il est possible de discerner le processus d'évaporation (et de fragmentation) de la flaque liquide.

En effet, on observe la formation irrégulière d'un mélange diphasique à la surface de la flaque (volutes claires visibles sur les images de droite de la figure II.80). Cette couche « nuageuse » présente une vitesse d'évolution (dans les trois dimensions de l'espace) très faible. Le nombre de structure caractéristique du nuage surplombant la flaque diminue au cours de son évolution pour laisser la place à des structures plus grossières. On distingue clairement sur les séquences vidéo la propagation des ondes de surpression au travers de cette couche.

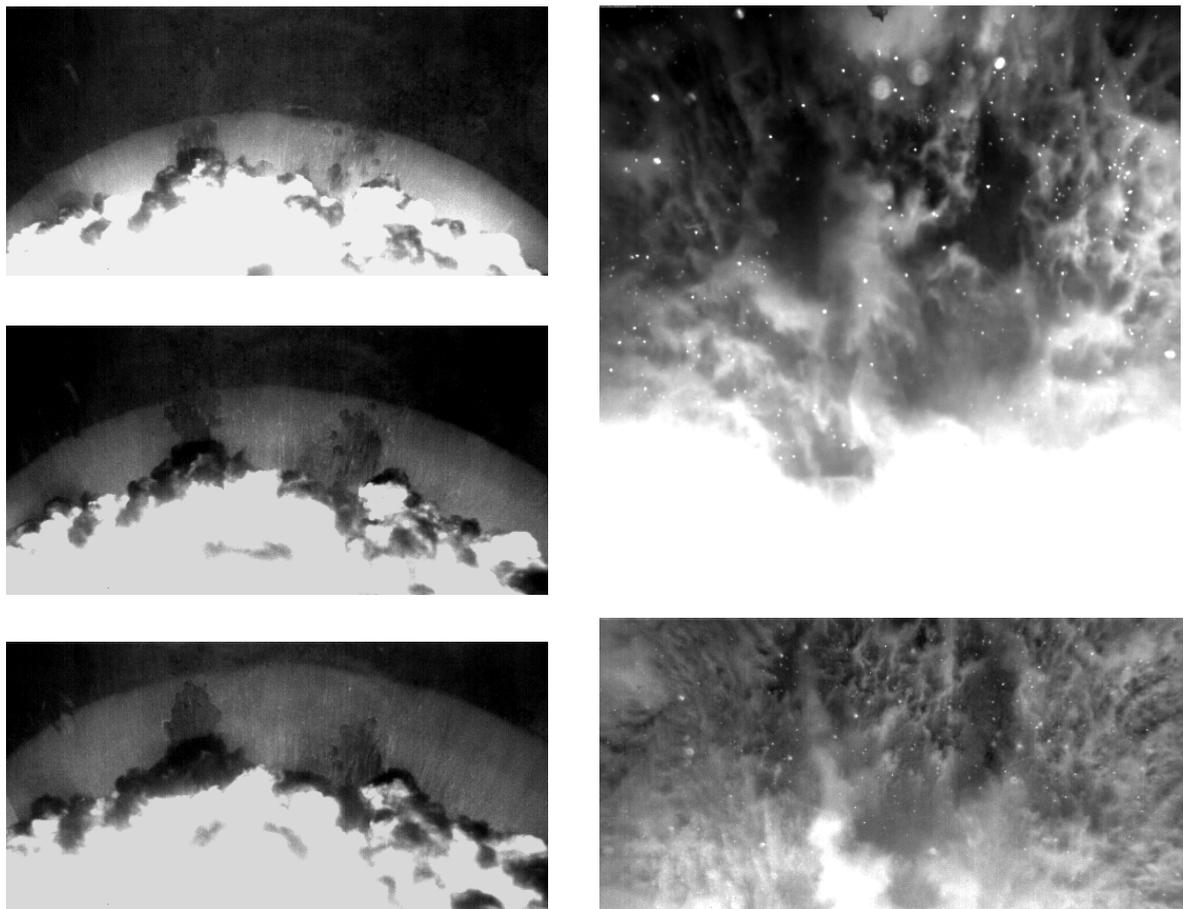


Figure II.80 Comportement d'une flaque de liquide lors d'une explosion en milieu clos – à gauche, on distingue l'onde de choc incidente et l'expansion des DP – à droite, évaporation de la flaque (zoom en haut) DP stabilisés au centre du volume et ondes de choc faibles.

Une vue latérale de l'intérieur du bunker nous a permis de comprendre les phénomènes se produisant à plus longs termes et le comportement macroscopique de la phase liquide. Il n'y a pas, pour le dispositif expérimental élaboré, d'arrachement massif d'éléments fluides par fragmentation de la flaque, due à la propagation du choc défilant au niveau de l'interface liquide / gaz.

Les images de la figure II.81 sont issues de l'enregistrement effectué lors d'un tir de V401, l'eau se trouvant au sol sur un tiers de la surface, juste en dessous du hublot de visualisation. Sur ces images, on voit clairement la présence d'éléments liquides en mouvement, de tailles et de formes très différentes. Selon la résolution de la caméra numérique, on peut estimer des longueurs caractéristiques comprises entre 1 et 20 mm.

Les trois images de cette figure correspondent à des temps de 333, 500 et 667 ms après la détonation de la charge explosive. Sur cet extrait les éléments liquides ont un mouvement global descendant. Au final, une partie de l'eau non vaporisée se retrouve au sol à l'issue de l'expérience.

De l'eau se condense également au niveau des parois et des zones vitrées (zones opaques de grandes dimensions, visibles sur l'image 1 par exemple).

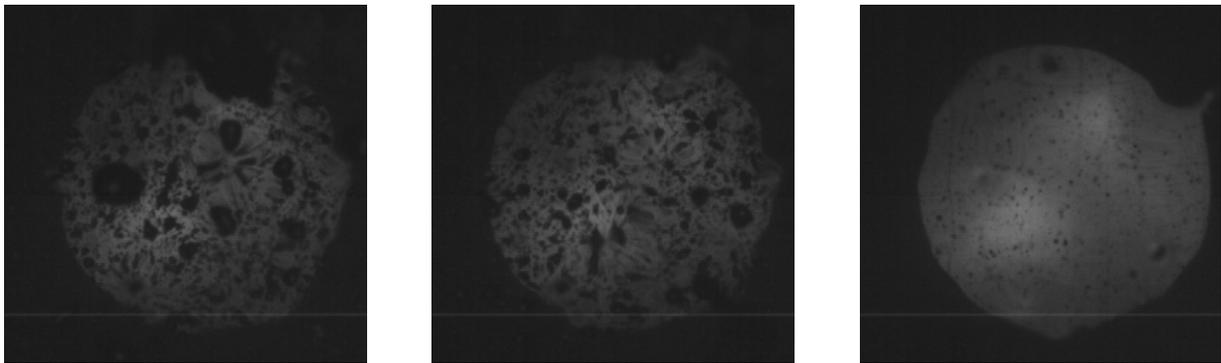


Figure II.81 Visualisation latérale, pour t compris entre 333 et 667 ms, de l'intérieur du bunker – 5 litres d'eau répartis sur un tiers de la surface au sol.

Ces observations qualitatives permettent une fois de plus de comprendre les signaux de surpression mesurée. On compare sur la figure II.82 deux historiques de surpression relatifs à une explosion de 100 g de TNT dans le bunker (courbe verte) et de l'explosion de la même charge en présence de 30 litres d'eau répartis sous forme de flaque (courbe mauve). Les enregistrements des signaux de sortie des capteurs piézoélectriques sont donnés sur 100 ms.

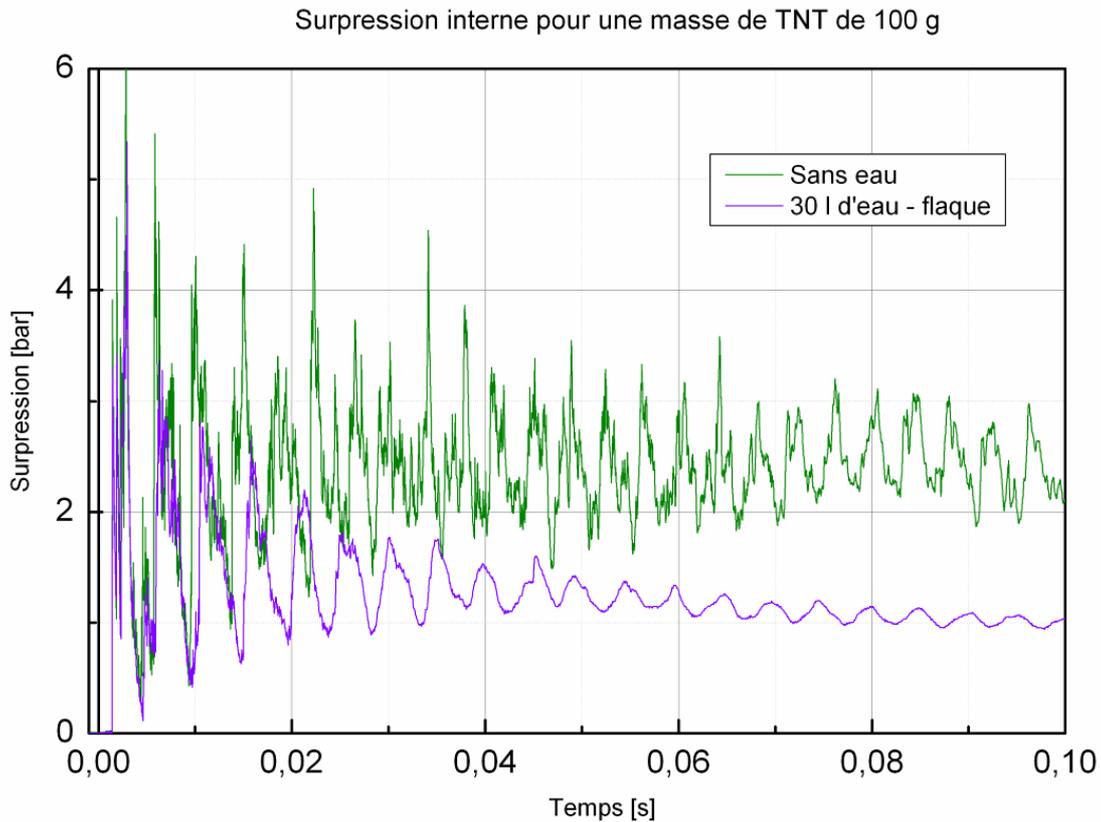


Figure II.82 Comparaison des signaux mesurés lors d'une expérience en présence de 30 L d'eau (courbe mauve) et une expérience sans eau (courbe verte), charge de 100 g de TNT

On constate de prime abord l'aspect peu bruité de la courbe mauve : la présence de l'interface eau/gaz atténue la propagation des ondes de choc (suivant z notamment) et modifie les variations de pression. De plus, le niveau moyen de pression diminue et la composante continue du signal reste en dessous du plateau de pression quasi-statique normalement atteint. Sur cet exemple, à masse d'explosif identique, la surpression interne est moitié moindre au bout de 100 ms en présence d'eau.

La présence d'une flaque d'eau modifie donc d'une part la dynamique des ondes au sein du volume d'étude et influe directement sur le champ de surpression par évaporation partielle du liquide et échanges thermiques entre phases (on néglige de plus le volume occupé initialement par la phase liquide).

Il est important de préciser que pour tous les exemples présentés dans cette section, l'eau lorsqu'elle est présente est en « excès » : si elle était vouée uniquement à servir au processus de vaporisation, l'énergie initialement disponible dans l'explosif ne serait pas suffisante pour évaporer la totalité du liquide. L'évent du bunker est également fermé.

Les signaux de pressions sont toutefois insuffisants pour quantifier les échanges entre phases. Ils permettent de mettre en évidence l'efficacité d'un tel processus en fonction de la quantité de liquide et de la topologie initiale de celui-ci. Les figures suivantes apportent quelques précisions à ce propos :

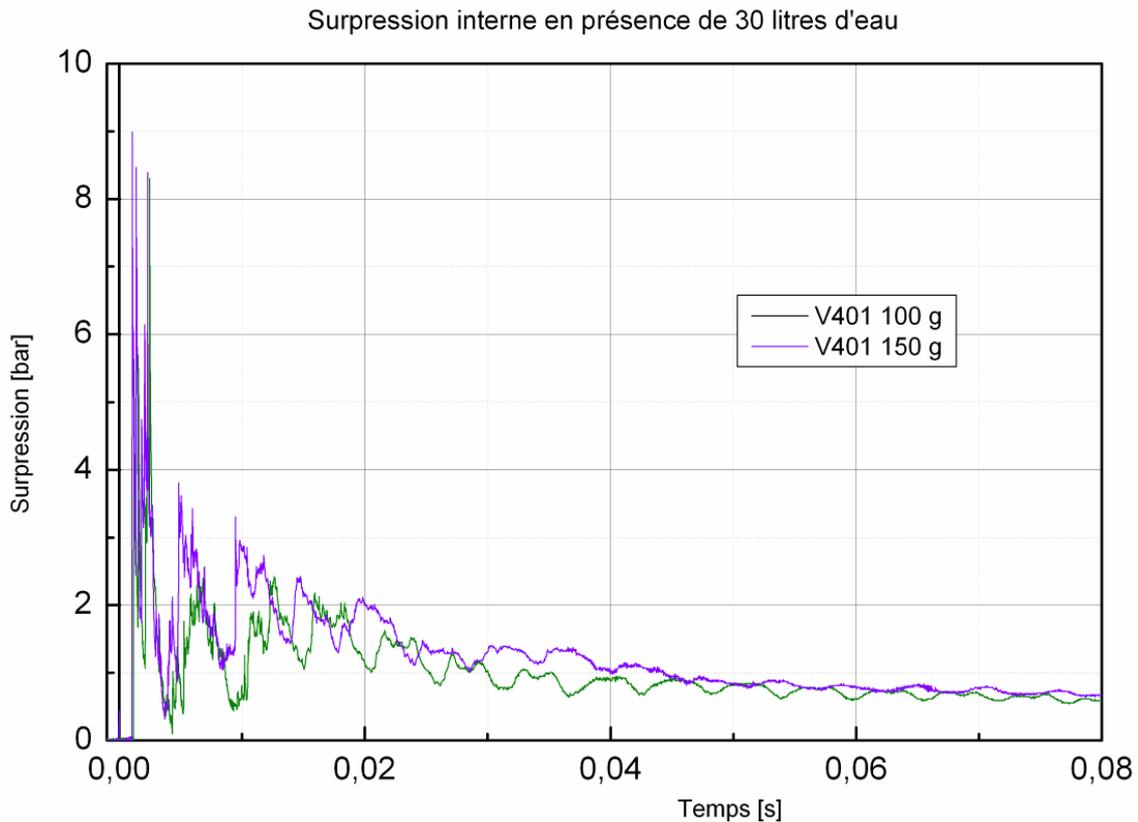


Figure II.83 Comparaison des signaux mesurés lors d'expériences en présence de 30 litres d'eau : avec 100 g de V401 (courbe mauve) et 150 g de V401 (courbe verte)

La figure II.83 permet de comparer l'influence de la quantité d'explosif : lorsque la masse initiale de V401 passe de 100 à 150 g, en présence chaque fois de 30 litres d'eau, les signaux de surpression tendent rapidement (à $t_0+50\text{ms}$) vers une surpression similaire de l'ordre de 1 bar. Le signal mauve relatif à la masse de 150 g est au dessus du signal vert (relatif à 100 g d'explosif) sur les 20 premières ms. La présence de liquide n'a pas d'influence sur cet horizon temporel. Par la suite, les deux courbes montrent une décroissance globale similaire. On peut lier ceci au processus de transfert d'énergie (et d'évaporation) entre phases. Là encore, on ne peut quantifier ni la quantité d'eau impliquée, ni la cinétique de ces échanges par les seuls signaux de surpression. On ne peut en effet garantir qu'il y a, tout au long du processus, conservation de la surface d'échange entre le liquide et les produits gazeux lorsque la masse d'explosif augmente.

Les figures II.84 et II.85 apportent du crédit à ces constatations expérimentales.

En effet, nous nous sommes assurés de la reproductibilité des mesures, et donc de la chronologie globale des événements internes au bunker, en effectuant plusieurs essais en tout point identique : quantité d'eau, répartition initiale du liquide, quantité et type d'explosif. Les courbes de la figure II.84 sont issues de deux expériences d'explosion de 100 g de V401, avec 5 litres d'eau présents sous forme d'une flaque recouvrant un tiers de la surface au sol. Le signal rouge foncé est obtenu sur le premier tir par un capteur piézo-résistif. Le signal rouge vif est obtenu sur le deuxième essai grâce à un capteur piézoélectrique. On note la très bonne reproductibilité de l'expérience en termes de surpression interne. L'utilisation de deux technologies de mesure différentes permet également de s'assurer du comportement global des senseurs dans l'environnement diphasique.

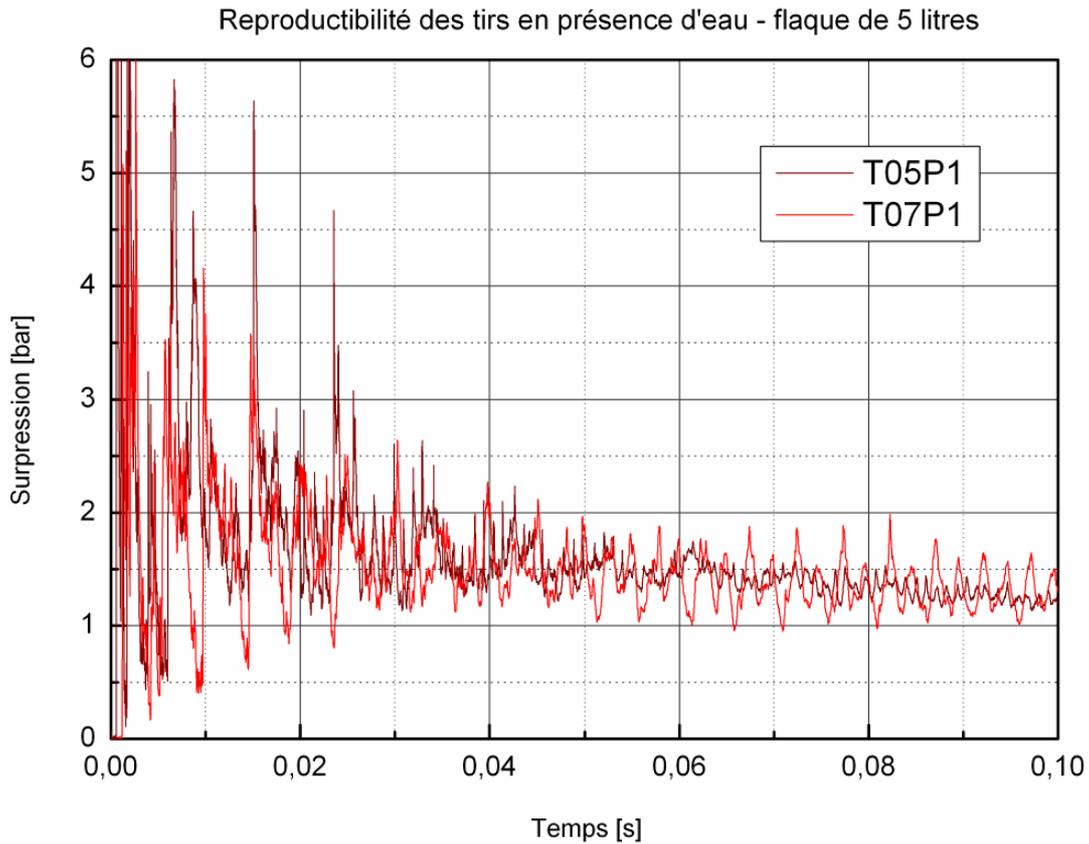


Figure II.84 Signaux mesurés lors de deux expériences identiques en présence de 5 litres d'eau

Sur la figure II.85, on représente les signaux, obtenus après filtrage, de trois expérimentations distinctes :

- détonation d'une charge de 100 g de V401 en présence de 2 litres d'eau (sous forme de flaques sur 1/3 de la surface au sol) – courbe mauve,
- détonation d'une charge de 100 g de V401 en présence de 5 litres d'eau (sous forme de flaques sur 1/3 de la surface au sol) – courbe verte,
- détonation d'une charge de 100 g de V401 en présence de 12 litres d'eau (sous forme de flaques sur 1/3 de la surface au sol) – courbe jaune.

L'application du filtre passe bas choisi met en évidence les variations continues de pression. On constate sur ce réseau de courbes que :

- Lors des trois expériences, la surpression atteint tout d'abord une valeur plateau similaire de l'ordre de 2 bars. On note toutefois un écart sensible entre les trois courbes dès ces premiers instants.
- Tout au long de l'enregistrement, plus la masse d'eau initiale est importante, plus la surpression est faible. Les écarts entre les courbes sont proportionnels aux différences de masse d'eau.
- Une chute de pression est mesurée au-delà de 200 ms.

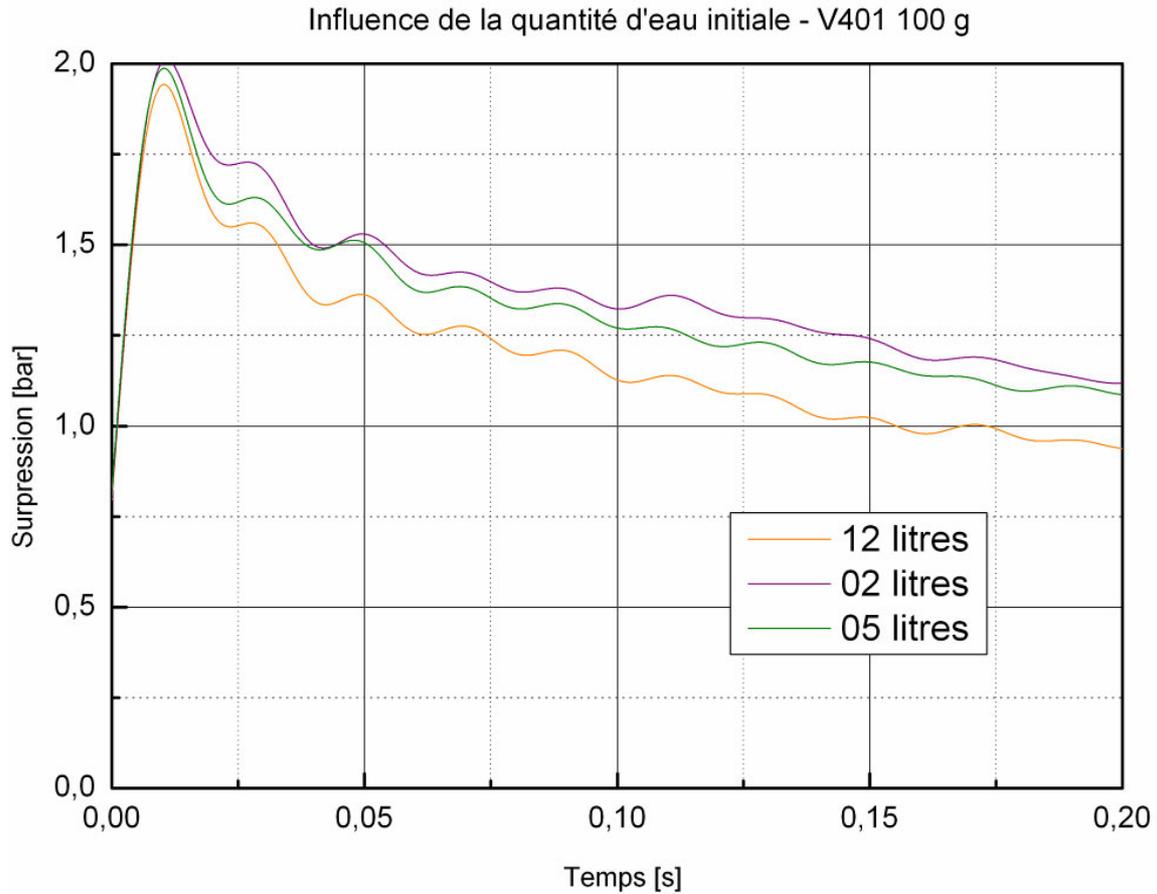


Figure II.85 Comparaison des signaux de surpression après application d'un filtre passe bas, pour trois masses d'eau différentes.

De ces quelques constats, on en déduit que, malgré une masse d'eau en excès et une disposition initiale identique, il y a une influence directe de la quantité d'eau que l'on peut attribuer à des évolutions distinctes de la surface d'échanges entre le liquide et le gaz au court du temps. Une fraction plus ou moins importante du liquide est vaporisée selon l'efficacité du mélange des différents constituants. L'eau restant sous forme liquide et initialement à température ambiante participe à la chute de pression en refroidissant l'atmosphère ambiante. Les signaux obtenus montrent que ces échanges thermiques entre phases s'installent dès les premiers instants.

On finit cette section en comparant les signaux de pression enregistrés lors d'expérimentations de destruction de containers en plastique remplis de liquide, placés dans le bunker. Le liquide est soit de l'eau, soit du TMP. En partie I, nous avons largement détaillé les résultats des campagnes de tir en présence de TMP. Les figures présentées ici montrent la succession d'évènements induits par la présence d'un liquide chimiquement inerte ou d'un liquide potentiellement réactif. La figure II.86 montre l'évolution de pression pour quatre situations. La charge explosive est identique lors des 4 expériences. La brèche du bunker est ouverte.

La courbe rouge correspond au cas de l'explosif seul. Le signal d'origine est filtré à 200 Hz. Cette courbe est affichée sur un intervalle de 50 ms uniquement. La courbe verte retranscrit la surpression lors de l'expérience de destruction de bidons remplis d'eau, les containers se situant le

long d'un mur latéral du bunker. Les deux autres courbes correspondent aux expériences avec du TMP. La différence de configuration est uniquement liée à la disposition initiale des bidons, proche de la charge explosive (courbe bleue), ou le long d'un mur (courbe noire).

La figure II.87 est un agrandissement de la figure précédente sur les 150 premières ms des expériences. Le caractère décroissant de la courbe rouge est accentuée par l'opération de filtrage ici. En appliquant sur les quatre signaux la même opération, on conserve une bonne reproductibilité des premiers instants suivant l'explosion de la charge. Quel que soit le type de liquide initialement présent, le processus de montée en pression quasi-statique est peu perturbé. Cela signifie que les processus de mélange forcé des gaz (par allers retours d'ondes) et de combustion secondaire ont eu suffisamment de temps pour se réaliser avant que les échanges entre la phase liquide et la phase gazeuse ne deviennent importants. Durant ce délai, il y a eu rupture des conteneurs, éjection et fragmentation du liquide sous forme de gouttes dans le volume V. Dans le cas de la flaque au sol, le délai d'installation des échanges entre phases est de fait plus court.

Ces échanges entre phases se traduisent sur des temps plus long au niveau des courbes de pression par une chute de cette dernière lorsque de l'eau est injecté dans le milieu, par une augmentation continue mais brutale (sur 50 à 100 ms) de la pression lorsque du TMP est injecté.

Pour ce dernier cas, la pression interne au bunker atteint un plateau dont la valeur doit être interprétée avec précaution de par la dérive thermique du capteur immergé dans un environnement en combustion. Le plateau indique toutefois une compétition entre la montée en pression du milieu due à la combustion du TMP (production de chaleur et de moles de gaz), et la détente due à l'éjection du mélange au travers de la brèche. Les différences notables entre les deux expériences de destruction du TMP ont été évoquées en partie I. Le processus d'évaporation / combustion est initié dans un délai plus ou moins long après la détonation de la charge selon la position initiale du liquide dans le volume.

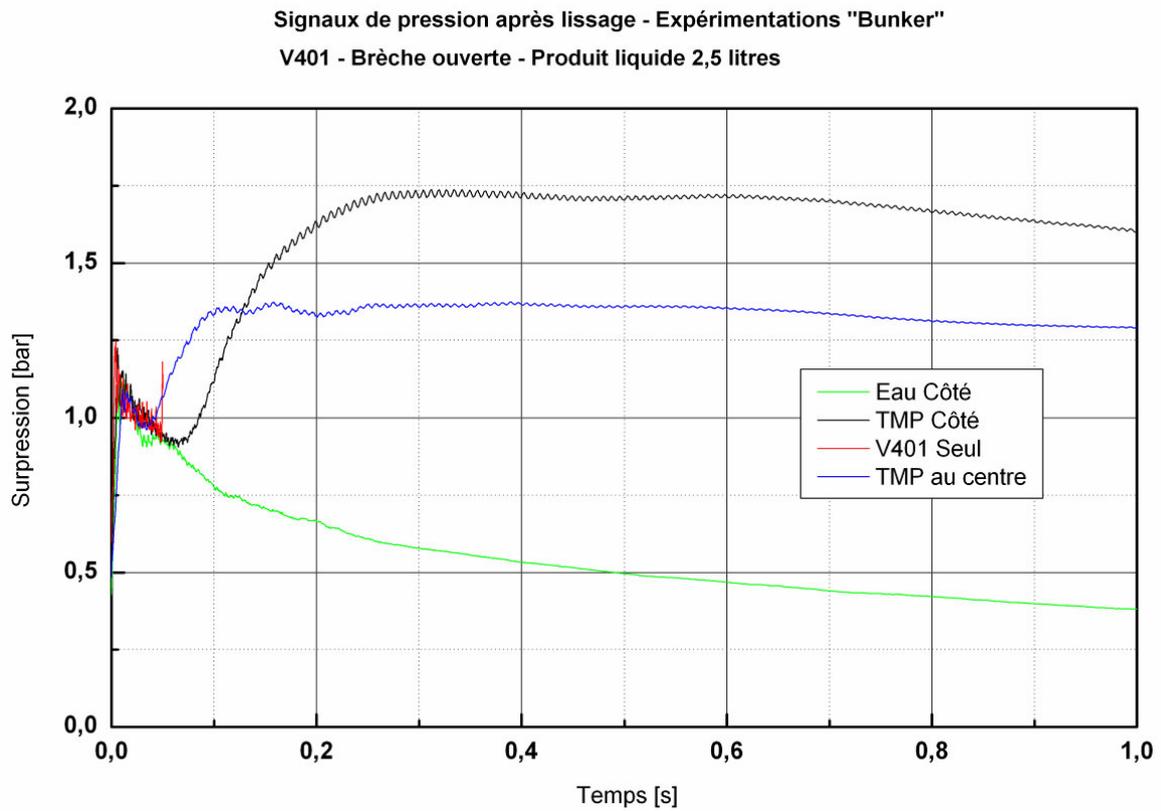


Figure II.86 Ensemble de courbes caractéristiques pour les quatre types d'expérimentations « bunker »

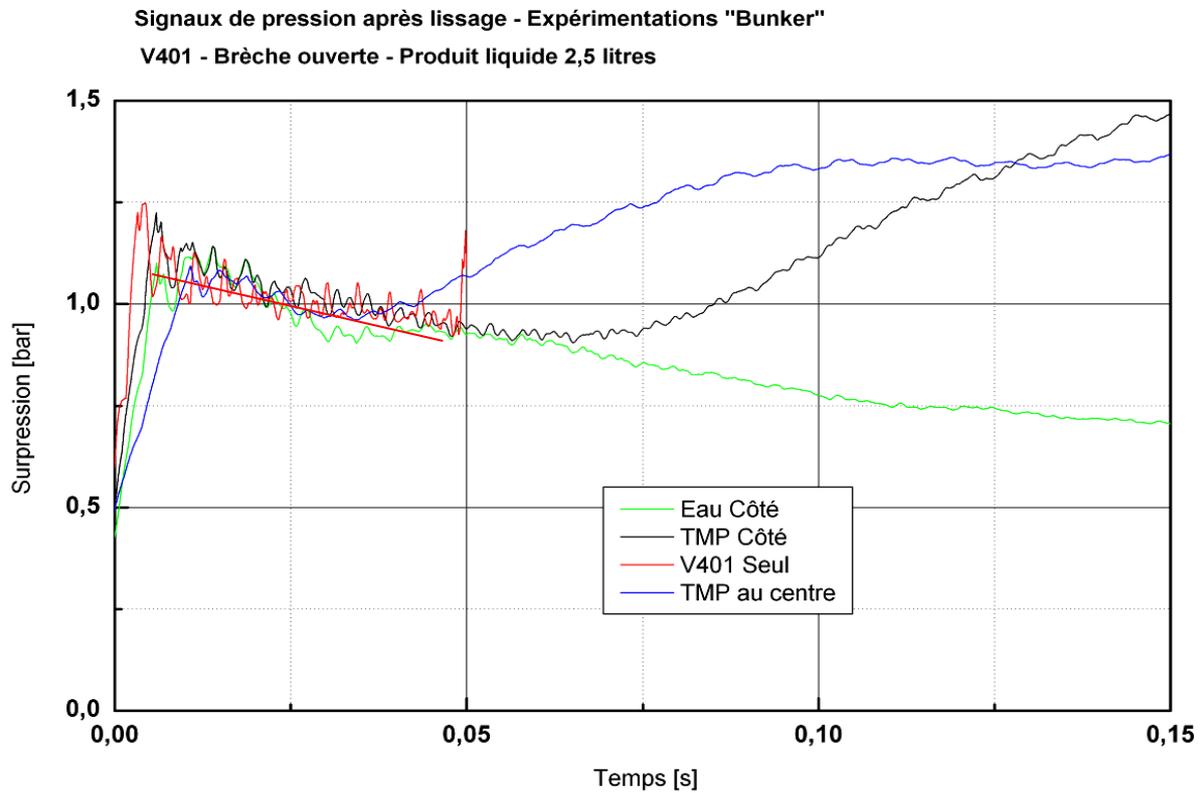


Figure II.87 Ensemble de courbes caractéristiques pour les quatre types d'expérimentations « bunker » - focus sur 150 ms suivant la détonation de la charge

Mesure de température en un point du volume par thermocouple de type K

On présente dans cette section, afin d'éclairer les résultats précédents, certaines courbes de température mesurée en un point du bunker, comme nous l'avons décrit en partie I et en annexe B, à l'aide de thermocouple de type K. Ces figures permettent de préciser des tendances et des ordres de grandeur de T, mais ne constituent qu'une image à travers la chaîne de mesure de la température vraie : les thermocouples utilisés ont un temps de réponse très grand (supérieur à 100 ms) par rapport aux temps caractéristiques de montée en pression et en température suite à l'explosion de la charge. De plus, lorsque du liquide est présent dans la pièce, il est possible que le point de soudure du capteur soit immergé dans un milieu diphasique.

Cependant, malgré ces précautions nécessaires, les courbes obtenues (issues de la campagne de tirs « bunker » de 2006, les températures sont indiquées en degré Celsius – annexe B) amènent les commentaires suivants :

- Figure II.88: Ces deux graphiques correspondent à des essais avec une masse de V401 de 150 g. La présence de liquide réduit de manière drastique la température maximale mesurable par le thermocouple. Il y a un rapport de 5,5 entre les deux températures maximales. Lorsque de l'eau est présente, la température maximale est de l'ordre de 100°C. L'inertie du capteur ne permet pas de conclure quant à la cinétique des échanges thermiques entre phases mais on indique cependant que la température maximale est atteinte après 200 ms environ. L'évaporation du liquide se déroule sur cet intervalle de temps.
- Figure II.89 : Les deux graphiques suivants correspondent à des expériences identiques mais mettant cette fois en œuvre des charges de 100 g seulement. Les mêmes observations peuvent être formulées. Les courbes ont des allures identiques aux précédentes. On note que la température maximale donnée par le thermocouple est de 390°C contre 550°C précédemment, en l'absence de liquide dans le bunker. Lors de l'essai avec de l'eau, la température ambiante n'excède pas à nouveau les 100°C.
- Figure II.90 : les deux derniers graphiques montrent la cohérence des signaux enregistrés en sortie des thermocouples. On compare en effet les courbes obtenues lors d'expériences mettant en jeu respectivement 150 g de V401 et 150 g de TNT :
 - o La température maximale atteinte avec du TNT (675°C) est supérieure à celle obtenue avec du V401 (550°C),
 - o Au travers de la fonction de transfert de la chaîne de mesure, le temps nécessaire pour atteindre la température maximale est de l'ordre de 1 seconde lorsque du TNT est utilisé, de 0,35 lorsque du V401 est utilisé.

Ces dernières remarques vont dans le sens des conclusions formulées au chapitre II.2.2. Elles montrent cependant que la mesure ponctuelle de température ne peut apporter que des informations qualitatives sur l'évolution du système diphasique étudié, tant sur le niveau de température que sur les processus d'échanges entre phases. L'inertie de la chaîne de mesure est ici rédhibitoire.

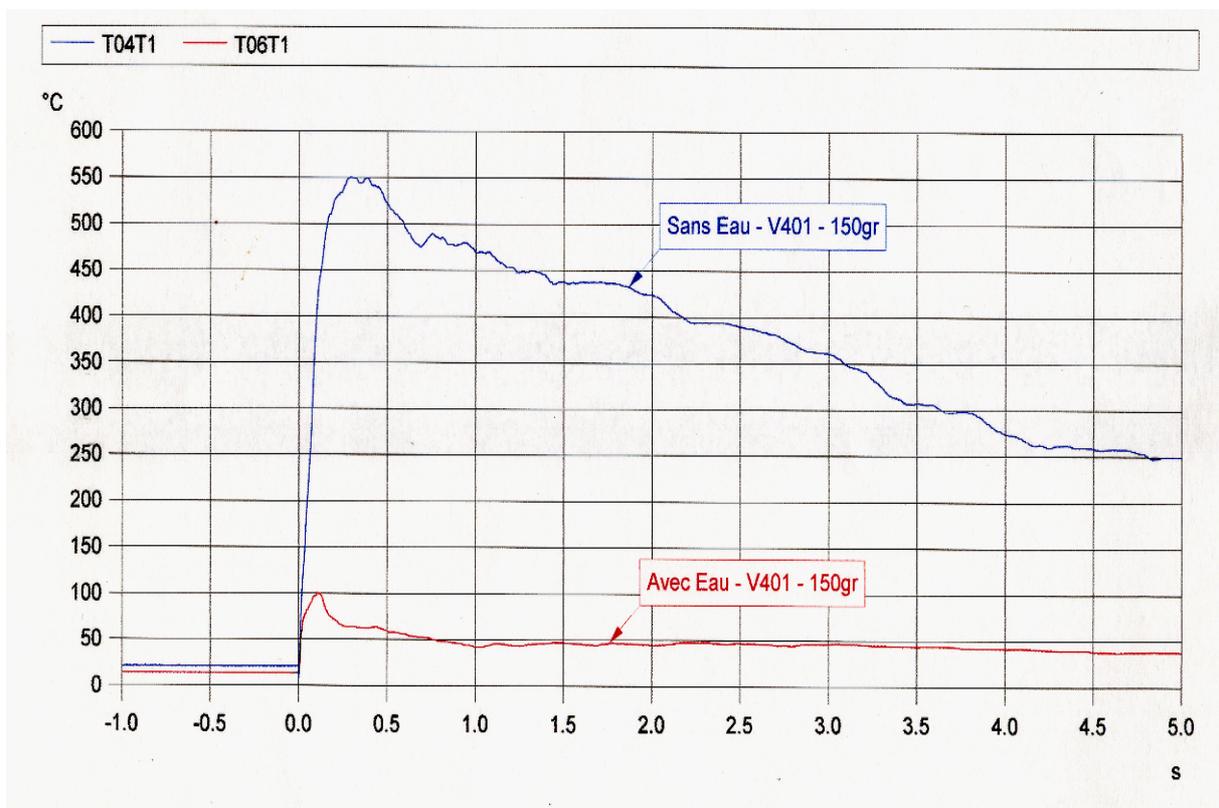
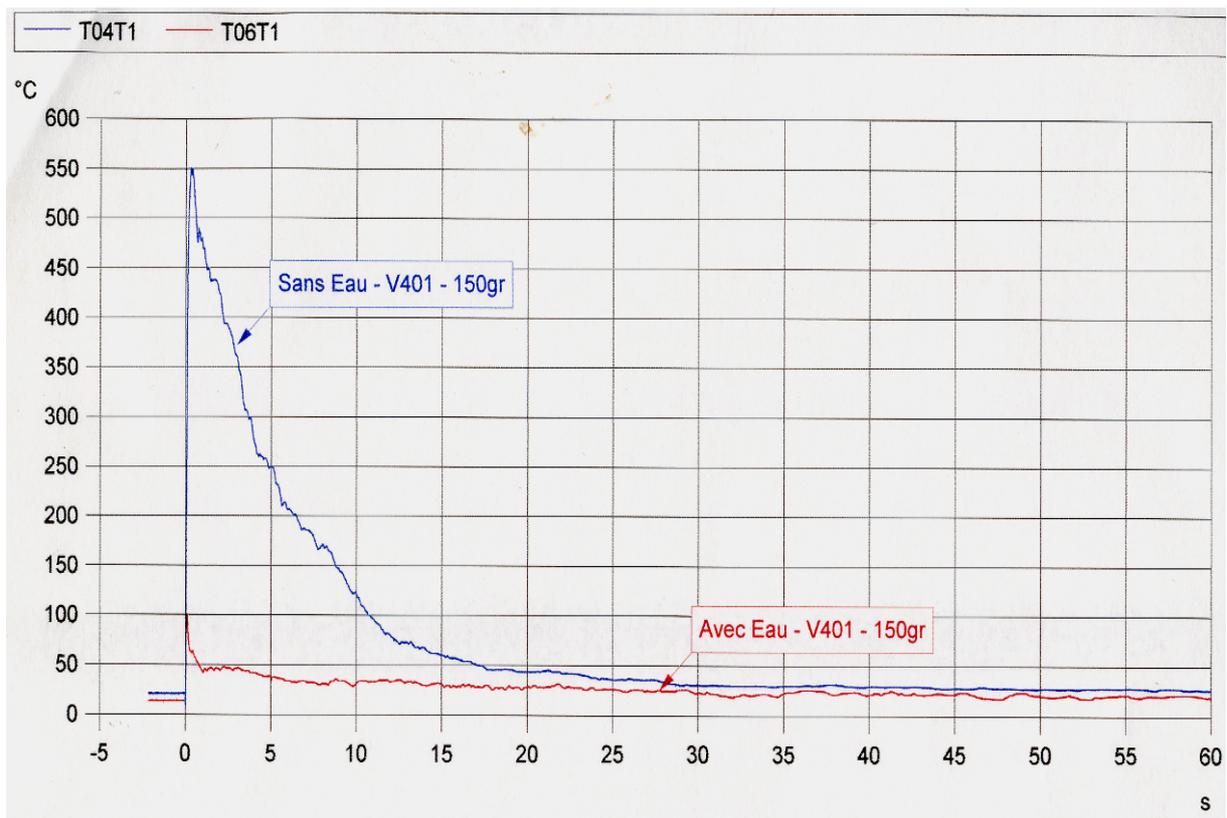


Figure II.88 Mesures de température en un point du volume V par thermocouple de type K – Comparaison des résultats avec ou sans eau dans le volume pour une charge de 150 g de V401 – En haut, comparaison sur 60 s, en bas, comparaison sur 5 s.

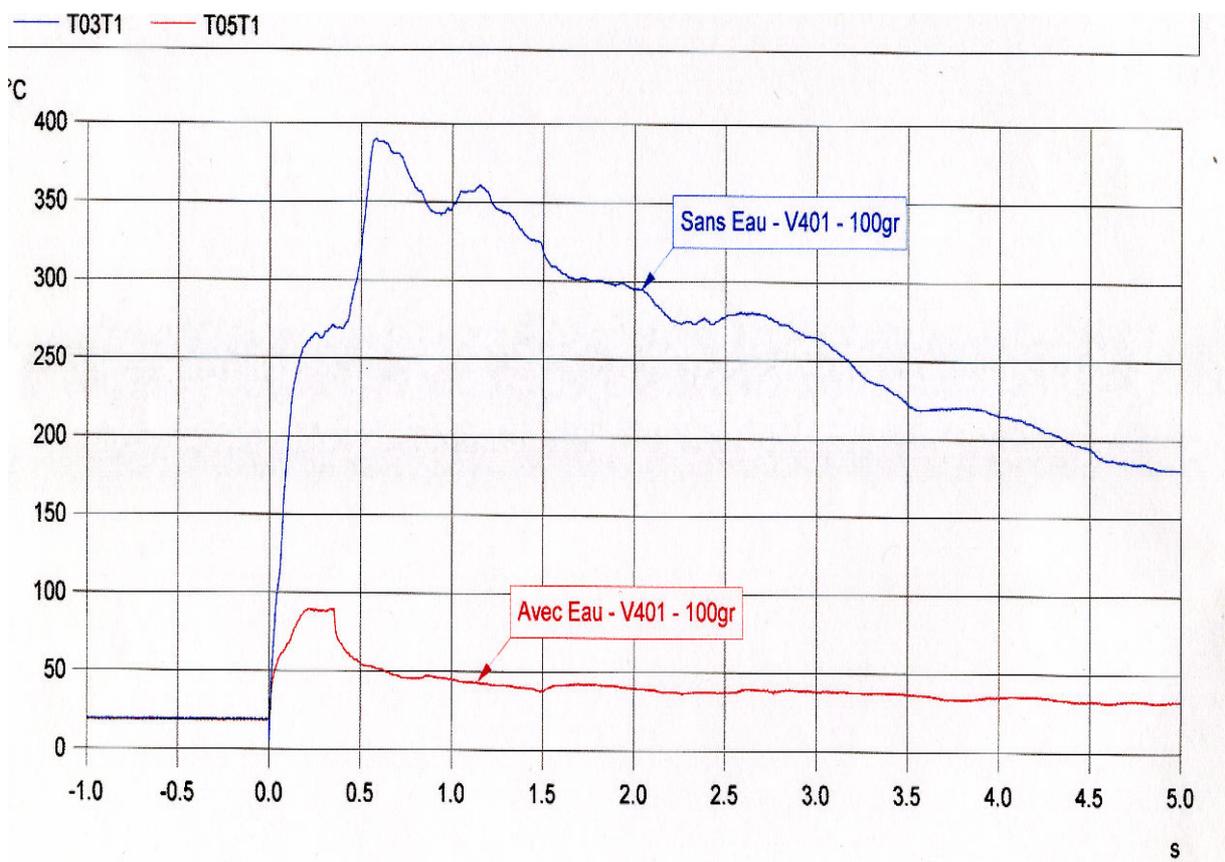
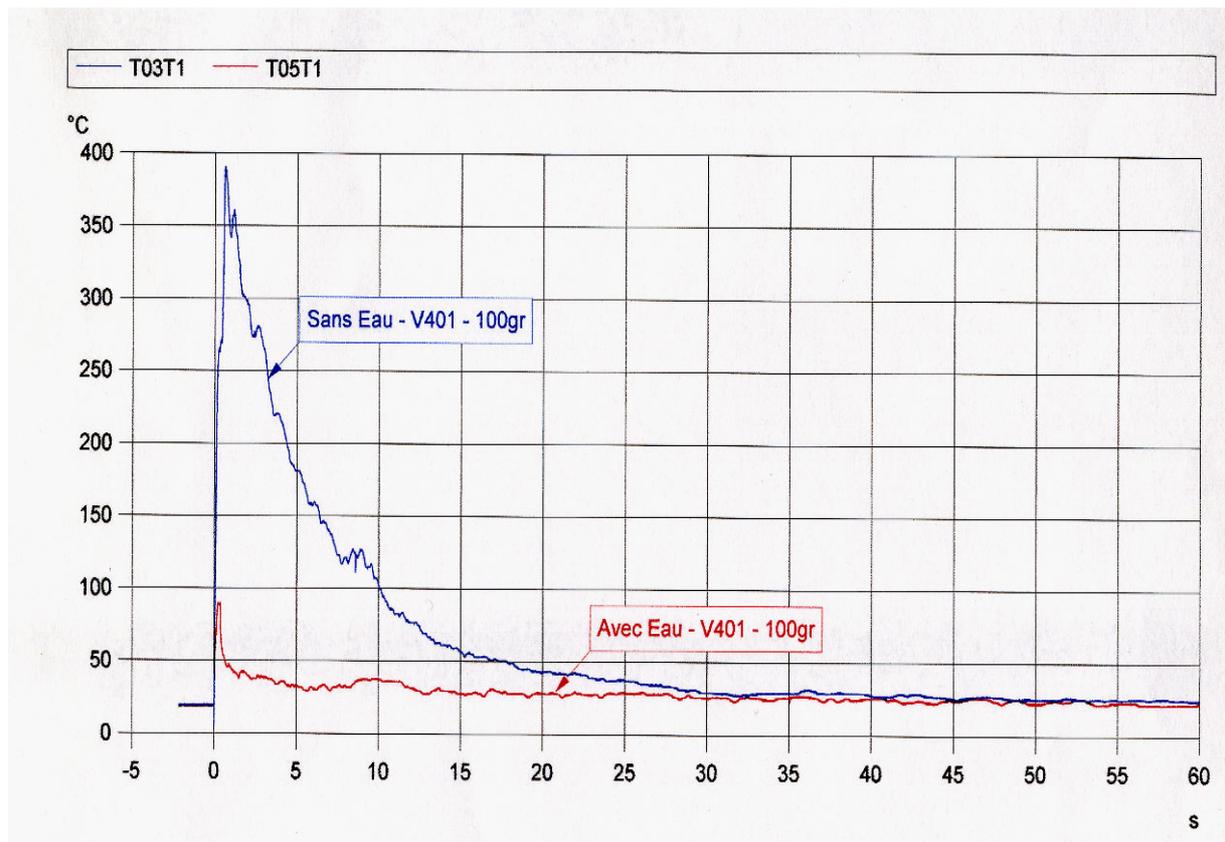


Figure II.89 Mesures de température en un point du volume V par thermocouple de type K – Comparaison des résultats avec ou sans eau dans le volume pour une charge de 100 g de V401 – En haut, comparaison sur 60 s, en bas, comparaison sur 5 s.

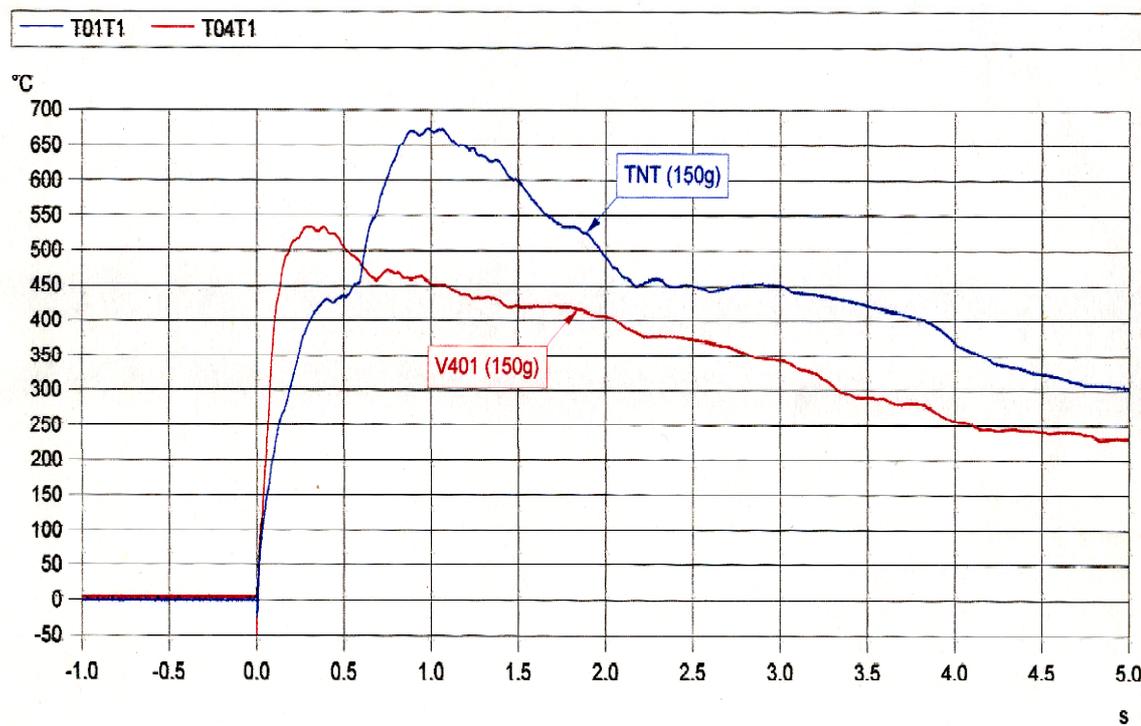
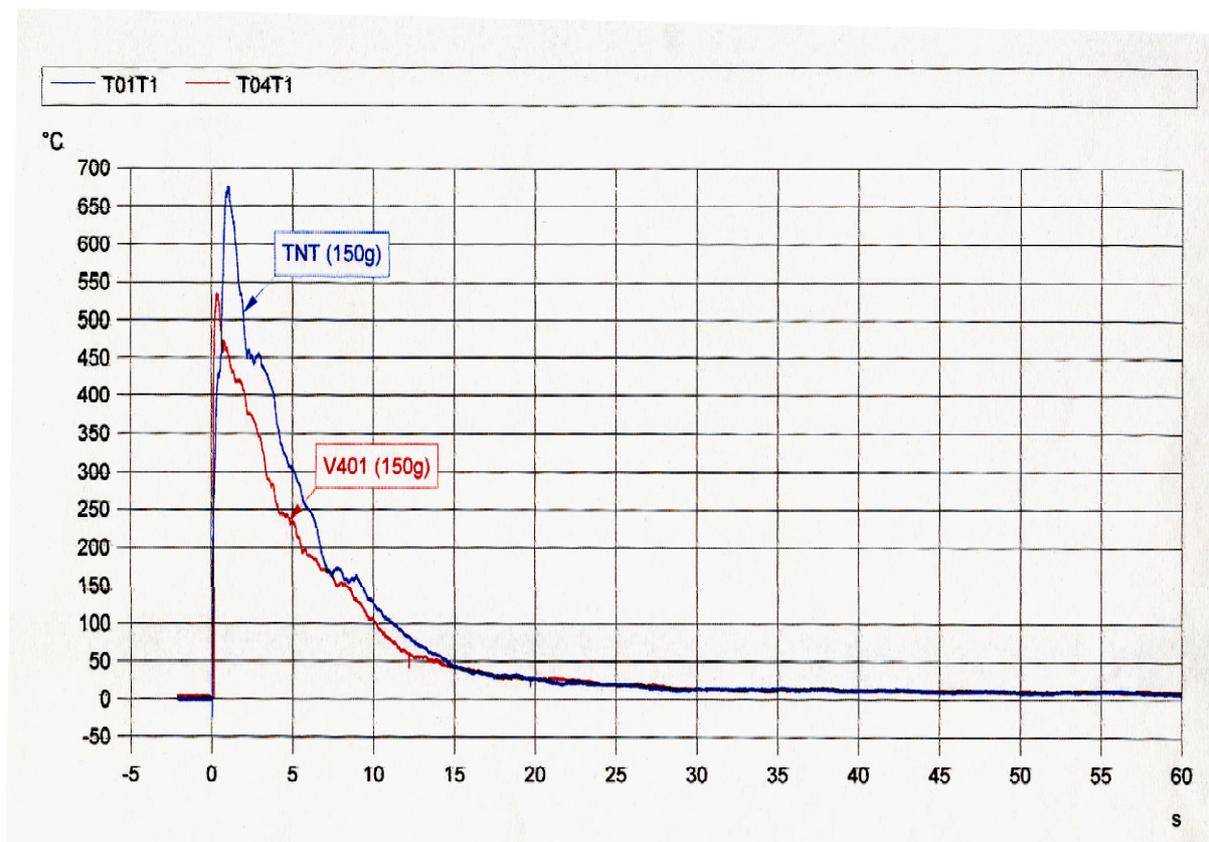


Figure II.90 Mesures de température en un point du volume V par thermocouple de type K – Comparaison des résultats pour une charge de 150 g de TNT et de V401– En haut, comparaison sur 60 s, en bas, comparaison sur 5 s.

II.4 Récapitulatif

On récapitule ici les résultats de notre étude, permettant de modéliser de manière réduite, l'évolution temporelle (en ne retenant que les événements de fréquences basses) des champs de pression et de température à l'intérieur d'un volume V , fermé ou partiellement ouvert vers l'extérieur, après la détonation d'une charge d'explosif de masse m .

- Sur un intervalle d'étude pour W fixé à $[0,01 - 0,3]$ kg/m^3 ,
- Sur un intervalle de temps inférieur à 1 seconde après le fonctionnement de la charge explosive,

Il est possible de modéliser la montée en pression homogène du milieu par une fonction du type :

$$\Delta P_{\text{exp}} = P_{\text{qst}, \text{exp}} \left[1 - \exp \left(\frac{-t}{\tau_{m, \text{exp}}} \right) \right],$$

- La pression quasi-statique finale est donnée par :

$$P_{\text{qst}} = Q_{\text{ex}} \cdot \frac{m_{\text{ex}}}{V},$$

avec $Q_{\text{TNT}, \text{exp}} = 43,822 \text{ bar} \cdot (\text{kg/m}^3)^{-1}$ et $Q_{\text{V401}, \text{exp}} = 31,288 \text{ bar} \cdot (\text{kg/m}^3)^{-1}$,

- Le temps de montée en pression (en seconde) est donnée par :

$$\tau_m = A_{\text{ex}} V^{1/3}$$

La température moyenne des produits de détonation, sur l'intervalle en W $[0,01 - 0,13]$ kg/m^3 peut s'exprimer :

- Sur $[t_0, t_1]$ (en ms), par la valeur de la température à l'état d'explosion à volume constant T_{cv} propre à chaque explosif.
- Sur $[t_1, t_2]$ (en ms), par un polynôme du second degré :

$$T_{\text{moy}} = aW^2 + bW + c$$

Avec $a_{\text{TNT}} = -67244 \text{ K}(\text{m}^3/\text{kg})^2$, $b_{\text{TNT}} = 17310 \text{ K m}^3/\text{kg}$, $c_{\text{TNT}} = 300 \text{ K}$

et $a_{\text{V401}} = -17281 \text{ K} \cdot (\text{m}^3/\text{kg})^2$, $b_{\text{V401}} = 9830 \text{ K m}^3/\text{kg}$, $c_{\text{V401}} = 300 \text{ K}$.

- Au-delà et pour $t < t_{\text{max}}$ (en secondes), il y a homogénéisation de la température dans le volume V , et donc diminution de la température des gaz chauds (tels que nous les avons définis) qui subsistent,

où t_1 est égal à $0,03 R_0$ et t_2 de l'ordre de 100 ms, supérieur à $2\tau_m$

Application, pour une charge de 100 kg placée dans un volume de 1000 m³ (soit W = 0,1 kg/m³):

Cas du V401 :

$$P_{qst} = 3,129 (+/- 0,16) \text{ bar}$$

$$\tau_m = 42 \text{ ms}$$

$$T_{cv} = 3663 \text{ K}$$

$$T_{moy} = 1110,2 \text{ K (+/- 111 K)}$$

Cas du TNT :

$$P_{qst} = 4,382 (+/- 0,22) \text{ bar}$$

$$\tau_m = 31 \text{ ms}$$

$$T_{cv} = 2998 \text{ K}$$

$$T_{moy} = 1358,6 \text{ K (+/- 136 K)}$$

Lorsqu'une ouverture de faible dimension vers l'extérieur est présente, le rejet à la brèche peut être pris en compte à travers l'évolution temporelle de la pression par l'introduction d'un terme supplémentaire :

$$\Delta P(t) = P_{qst} \left(1 - \exp\left(\frac{-t}{\tau_m}\right) \right) \exp\left(\frac{-t}{\tau_v}\right)$$

Lorsqu'un liquide inerte d'un point de vue réactif est présent, l'échauffement puis l'évaporation du liquide entraîne une chute de pression dans l'enceinte. Lorsque le produit liquide est réactif (combustible), après un délai directement lié à la disposition initiale du liquide et aux modes de mélanges des phases en présence, il peut y avoir une mise en combustion du mélange dans l'enceinte.

Au final, quel que soit le type de liquide présent, il y a compétition entre plusieurs phénomènes : montée en pression et température suite à l'explosion, modification des propriétés thermodynamiques du volume de travail suite à l'interaction entre les gaz et le liquide, chute de pression et de température par expulsion des gaz au travers de la brèche et à cause de phénomènes diffusifs à long terme.

Dans la partie III, on va maintenant aborder la modélisation de ces phénomènes et de leur couplage.

II.5 Bibliographie Partie II

Détonations sphériques et documents de référence

- [53] S.I. Anisimov, Ya.B. Zel'dovich, Rayleigh Taylor instability of boundary between detonation products and gas in spherical explosion, *Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz.*, 3, pp 1081-1084, 1977
- [54] S.I. Anisimov, Ya.B. Zel'dovich, M.A. Inogamov, M.F Ivanov, The Taylor instability of contact boundary between expanding detonation products and a surrounding gas, *Shock Waves, Explosions and Detonations, Progress in Astronautics and Aeronautics Series*, 87, AIAA, pp 218-227, 1983
- [55] Dewey, J.M, The air velocity in blast waves from TNT explosions, *Proceedings of the Royal Society*, vol. 279, 1964
- [56] Kingery, C. N., *Airblast Parameters versus Distance for Hemispherical TNT Surface Bursts*, BRL Report No. 1344, September 1966.
- [57] Brode H.L, *A calculation of the last wave from a spherical charge of TNT*, 1958
- [58] Ames, R.G., Quantitative distinction between detonation and afterburn energy deposition using pressure-time histories in enclosed explosions, *NSWC, International Detonation Symposium*, 2006
- [59] Vibe, I.I., Semi empirical expression for combustion rate engines, *Proceedings of conference on piston engines*, URSS Academy of Sciences, Moscow, pp 185-191, 1956
- [60] A.L. Kuhl, *Spherical Mixing Layers in Explosions*, Special Review – A.K Oppenheim, chap. 13, pp 291-319
- [61] M. A. Cooper, M. R. Baer, R. G. Schmitt, M. J. Kaneshige, R. J. Pahl, and P. E. Desjardin, *Understanding enhanced blast explosives: a multi-scale challenge*, Sandia National Laboratories, Technical Paper, 2006
- [62] P. Wolanski & al., « Visualization of Turbulent Combustion of TNT Detonation Products in a Steel Vessel », *17th Int. Colloquium on the dynamics of Explosions and Reactive Systems*, Heidelberg, 1999.
- [63] W.A. Trzcinski, J. Paszula, Thermodynamic analysis of afterburning of detonation products in confined explosions, *Journal of Energetic Materials*, vol. 20, 195-222 2002
- [64] E. Muzychuk, M. Mayseless, I. Belsky, Influence of the post-detonation burning process on blast wave parameters in air, *22nd Int. Symp. on Ballistics*, November 14-18, 2005, Vancouver.
- [65] D.L. Frost, F. Zhang, *The nature of heterogeneous blast explosives*, MABS, 2006.

- [66] H. Reichenbach, P. Neuwald, A.L. Kuhl, Role of precision laboratory experiments in the understanding of large-scale blast phenomena, Julius J. Meszaros Lecture, MABS 17, Las Vegas, 2002
- [67] H. Reichenbach, P. Neuwald, Turbulent mixing in explosions, Technical Report 200000825033, DoD – DTRA, DSWA-TR-98-53, 2000
- [68] A. Klomfass, Numerical investigation of fluid dynamic instabilities and pressure fluctuations in the near field of a detonation, 20th Int. Symposium on Military Aspects of Blast and Shock, Oslo, 2008
- [69] E. Rottenkolber, W. Arnold, Modelling Aerobic Afterburn of detonation products, ISL Symposium Protection Perforation Detonics, Saint-Louis, 2009
- [70] G. Baudin, L. Munier, A simple URANS approach for secondary combustion of HE detonation products, 2009
- [71] K. Balakrishnan, F. Genin, D.V. Nance, S. Menon, Numerical study of blast characteristics from detonation of homogeneous explosives, Shock Waves 20:147–162, 2010
- [72] R.H. Granholm, H.W. Sandusky, J.E. Felts, Factors affecting internal blast, Shock Compression of Condensed Matter 2007, American Institute of Physics, 2007
- [73] N.N. Semenov, Chain Reactions, Leningrad, 1934, traduit en anglais, Chemical Kinetics and Chain Reactions, Oxford University Press, 1935
- [74] N.N. Semenov, Some problems in chemical kinetics and reactivity, vol.1 et vol.2, Princeton University Press, 1958 et 1959
- [75] A.J. Lotka, Elements of Mathematical Biology, Dover Publications Reprint, 1924
- [76] V. Volterra, Principles of biological mathematics: first part, Acta Biotheoretica, vol.3 n°1, 1937

Combustion secondaire des produits de détonation d'un explosif – Approche thermochimique

- [77] L.E. Fried, W.M. Howard, P.C. Souers, Cheetah 2.0 User's Manual", LLNL, UCRL-MA-117541, Rev. 5, 1998.
- [78] J.L. Maienschein, Estimating equivalency of explosives through a thermo chemical approach, LLNL,
- [79] D.L. Ornellas, Calorimetric determinations of the heat and products of detonation of explosives: October 1961 to April 1982, Lawrence National Laboratory report UCRL-52821, 1982.
- [80] D.L. Ornellas, R.R. McGuire, Heats and products of detonation of TNT under varying conditions of confinement and density, Technical Report, LLNL, 1979
- [81] B.M. Dobratz, LLNL Explosives Handbook, Properties of chemical explosives and explosives simulants, UCRL-52997, 1981

- [82] A.L. Kuhl, M. Howard, L. Fried, « Thermo dynamical Model of Afterburning in Explosions», 34th ICT Conference, Karlsruhe, 2003
- [83] P. Neuwald, H. Reichenbach, A.L. Kuhl, After burning of nitropenta products in a calorimeter, LLNL UCRL-JC-134680, 17th Intern. Colloquium on Dynamics of Explosions and Reactive Systems, 1999
- [84] S. Cudzilo, R. Trebinski, W.A. Trzinski, Comparison of heat effects of combustion and detonation of explosives in a calorimeter bomb, 29th International annual Conference of ICT, Karlsruhe, 1998
- [85] Ki-Bong Leen et al., Relationship between combustion heat and blast performance of aluminized explosives, 2008

Détonation en milieu clos et dans une infrastructure

- [86] Munier L., Joubert M., Chapelle S., Caractérisation expérimentale du terme source généré lors d'une agression d'une cible durcie contenant des produits chimiques – expérimentations à l'échelle 1/8e, T2006-00021/CEG/DR
- [87] X. Maldague, L. Munier, « Caractérisation du phénomène de postcombustion d'un explosif classique », rapport CEG D2005-00089/CEG/NC, 2005
- [88] S. El Mai, S. Cargill, A. Milne, Analysis of closed volume experiments with octoviton, Technical Report FGE Ltd, TR074/06, 2006
- [89] W.E Baker et al., Quasi-static pressure, duration and impulse for explosions in structures, Us Army Report (Abstract of TM5 1300)
- [90] W.E Baker, et al., Estimates of blow down of quasi-static pressures in vented chambers, Southwest Research Institute Report n°2 EM CR 76029, US Army,1975
- [91] F. Togashi, Numerical modelling of C4 long term blast wave evolution in confined rooms, SAIC, 20th Military Aspects of Blast and Shocks Symposium, Oslo, 2008
- [92] I.G Cullis et al., Blast structure interaction and the role of secondary combustion, 23rd international symposium on ballistics, Tarragona, 2007
- [93] A. Lefrançois, G. Baudin, J.L. Crémoux, « Efficacité des explosifs non idéaux pour munitions anti-bunker, cas de l'effet de souffle », rapport technique T2000-00005/CEG/CD, 2000
- [94] R. Laurensou, L. Borny, « Comportement de dalles en béton armé soumises à la détonation en milieu confiné d'une charge explosive calibrée », rapport d'essais GERBAM 607/04/A/DR/W 120, 2004
- [95] Y. Jacob, « Évaluation des explosifs en milieu clos », rapport technique GERBAM 1/89/DR/W, 1989

- [96] C.S. Sheffield, S.M. Babcock, « Sub – Scale in – room weapon tests », 17^e International Symposium of Military Aspects of blast and shock, 2002
- [97] W.R. Seebaugh et al., « Summary of collateral effects experiments conducted during fiscal year 1996 », DTRA, Technical Report, 2000,
- [98] D. Tassia, « Internal Blast Tests Support the Tomahawk and APET Programs », Indian Head Division Naval Surface Warfare Centre, 1996
- [99] J.R. Carney, et al., Atmospheric effects on the combustion of detonating aluminized explosives, Shock Compression of Condensed Matter,, 948-951, 2006
- [100] C. Needham, Update on the status of numerical modelling of non-ideal explosives, 20th Int. Symposium on Military Aspects of Blast and Shock, Oslo, 2008
- [101] A.Milne, Technical Arrangement Meeting Minutes et communications personnelles, 2007 - 2009

Travaux Canadiens DRDC Suffield et McGill University

- [102] F. Zhang et al., Post-detonation energy release from TNT Aluminium explosives, Shock Compression of Condensed Matter, 885-888, 2007
- [103] D.L. Frost, S .Goroshin, R. Ripley, F. Zhang, Effect of scale on the blast wave from a metalized explosive, 13th Detonation Symposium, Norfolk, 2006.
- [104] F. Zhang, A. Yoshinaka, J. Anderson, R. Ripley, Confined heterogeneous blast, MABS 2008, Oslo
- [105] Ripley, R.C et al., Explosion performance of aluminized TNT in a chamber, Military aspects of blast and shocks, Oslo, 2008.

Travaux du binôme Lawrence Livermore National Laboratory / Ernst Mach Institute

- [106] A.L. Kuhl et al., Evolution of turbulent fields in explosions, Article in Zeldovich Memorial, 258-260, 1994
- [107] A.L Kuhl, R.E. Ferguson, Spherical combustion layer in a TNT explosion, article UCRL-JC-143658, LLNL, 17th Int. Symposium on Military Aspects of Blast and Shock, Las Vegas, 2002
- [108] A.L. Kuhl, M. Howard, L. Fried, Thermodynamic model of afterburning in explosions, 34th International ICT Conference on Energetic Materials, 2003
- [109] A.L. Kuhl, R.E Ferguson, J.B Bell, Thermo-gas-dynamic model of afterburning in explosions, 19th Int. Colloquium on Dynamics of Explosions and Reactive Systems, 2003
- [110] A.L. Kuhl, et al., Visualization of mixing and combustion in TNT explosions, Article submitted to Extreme States of Substance Detonation Shock Waves, Sarov, UCRL-JC-141574-Rev-1, 2001

- [111] A.L. Kuhl, A.K. Oppenheim, R.E. Ferguson, Thermodynamics of combustion in a confined explosion, pp. 182-184 12th All union Symposium on combustion and Explosion, 2000
- [112] A.L. Kuhl, A.K. Oppenheim, « Turbulent Combustion in the Self-Similar Exothermic Flow Limit », Advanced Computations and Analysis of Combustion, pp. 388-396, ENAS Publishers, Moscow, 1997.
- [113] A.L. Kuhl, J. Forbes, J. Chandler, A.K. Oppenheim, R. Spektor, R.E. Ferguson, “Confined combustion of TNT explosion products in air”, UCRL -JC-131748 report, August 31, 1998.
- [114] A.L. Kuhl, R.E. Ferguson, A.K. Oppenheim, « Gas dynamics of Combustion of TNT Products in Air », Archivum Combustionis, N° 19, pp .67-89, 1999.
- [115] A.L. Kuhl, B. Khasainov, J.B. Bell, Two-phase model of combustion in explosions, 37th International Annual Conference of ICT on Energetic Materials, Karlsruhe, 27-30, 2006.
- [116] J.B. Bell, A.L. Kuhl, V.E. Beckner, Simulation of enhanced-explosive devices in chambers and tunnels, UCRL-CONF-231548, 2007.
- [117] A.L. Kuhl, H. Reichenbach, Combustion effects in confined explosions, Proceedings of the Combustion Institute 32, 2291-2298, 2009
- [118] L.D. Daily, Simulating afterburn with LLNL hydrocodes, UCRL-TR-206313, LLNL, 2004
- [119] P. Neuwald, H. Reichenbach, A.L. Kuhl, Shock dispersed fuel charges combustion in chambers and tunnels, Energetic Materials 34th ICT conf, 13.1-13.14, 2003
- [120] R.B. Pember, A.L. Kuhl, H. Reichenbach, P. Neuwald, Explosion-Induced turbulent mixing in chamber systems, rapport UCRL-JC-132405-Ext-Abs, Lawrence Livermore National Laboratories

Effets thermo radiatifs et signature d’une boule de feu

- [121] B.J. Steward, Reproducibility, distinguishability, and correlation of fireball and shockwave dynamics in explosive munitions detonations, Ph. D Thesis, US Air Force Institute of Technology, AFIT/GAP/ENP/06-019, 2006
- [122] K.C. Gross, Phenomenological model for infrared emissions from high explosive detonation fireballs, Dissertation, Department of the Air Force Air University, Institute Of Technology, AFIT/DS/ENP/07-03, 2007
- [123] T.W. Warren, Characterization of detonation phenomena observed in high-speed, visible imagery, Thesis, Department of the Air Force Air University, Institute Of Technology, AFIT/GAP/ENP/06-20, 2006
- [124] T. Piehler et al., High speed laser imaging, emission and temperature measurements of explosions, Army Research Laboratory, Reprint of IMEMTS Symposium, ARL-RP-137, 2006

- [125] J. Mott Peuker, P. Lynch, H. Krier, N. Glumac, Optical depth measurements of fireballs from aluminized high explosives, *Optics and Lasers in Engineering* 47 1009–1015, 2009
- [126] M.O Sturtzer, High speed spectroscopy of explosions of metalized explosives, MABS 20, Oslo, 2008
- [127] S. Goroshin, D.L. Frost, J. Levine, A. Yoshinaka, F. Zhang, Optical pyrometry of fireballs of metalized explosives, *Propellants, Explosives, Pyrotechnics* 31, n°3, pp 169-181, 2006
- [128] Ritter, J.J et al., Characterization techniques employed to determine the energy release of reactive materials, Amry Research Laboratory, ARL-TR-5125, March 2010, 2010
- [129] Gelfand, B. Diagnostics of the afterburning of detonation products, 2005
- [130] J. Wilkinson, J.M. Lightstone, C.J. Boswell, J.R Carney, Emission spectroscopy of aluminium in post-detonation combustion, *Shock Compression of Condensed Matter – 2007*, American Institute of Physics, 2007
- [131] P. Vasseur, Propriétés optiques des gaz : modélisation du rayonnement émis par un nuage de gaz et de particules en expansion, Thèse de doctorat, Université Paris X Nanterre, 2008
- [132] D. Ramel, Détermination optique de la température d'un volume de produits de détonation, Thèse de doctorat, Université Paris X Nanterre, 2008
- [133] J. Legrand, Etude de l'émission radiative des produits de détonation d'explosifs solides lors d'une explosion aérienne, rapport de projet de fin d'études Master II, ENSIETA / Université Paris X, 2008
- [134] L. Munier, Secondary combustion of detonation products with surrounding air – Experimental characterization of fireball dynamics, 22nd ICDERS, Minsk, July 2009

Influence de la présence de liquide

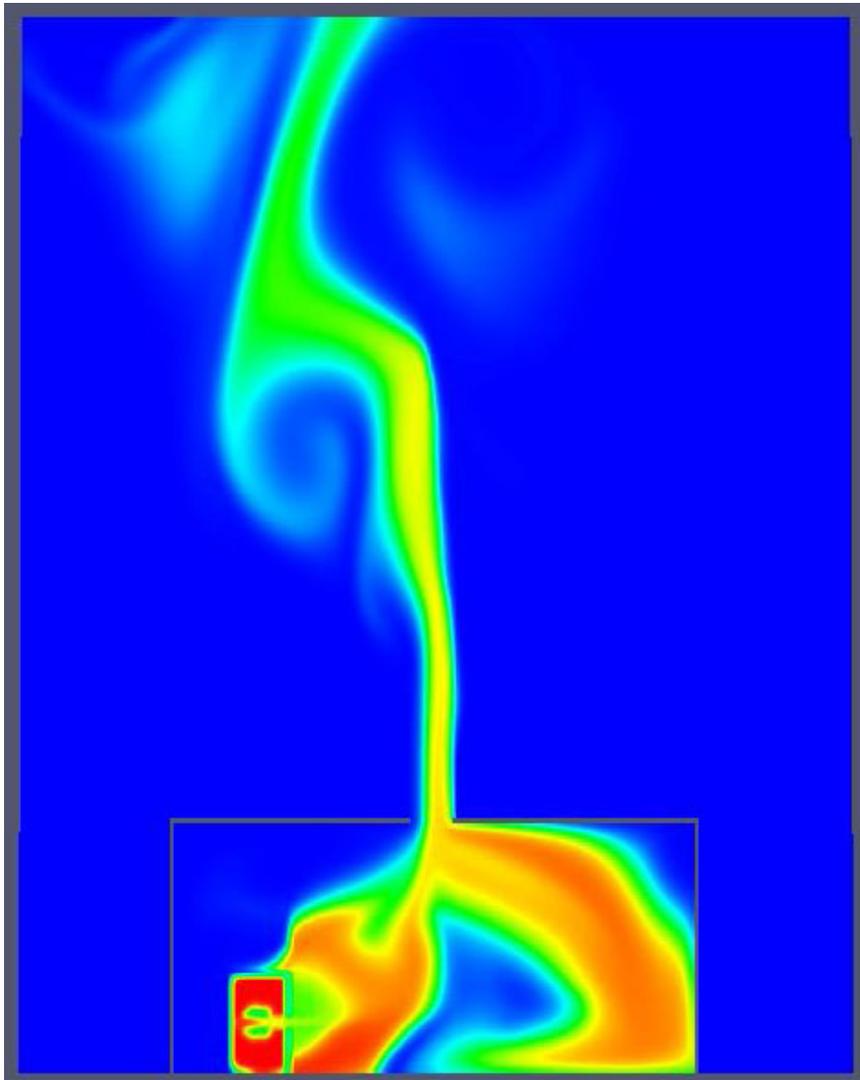
- [135] H.D. Willauer, R. Ananth, J.P Farley, F.W. Williams, Mitigation of TNT and Destex explosion effects using water mist, *Journal of Hazardous Materials*, 165, pp 1068-1073, 2009
- [136] M.E. Larsen, Aqueous foam mitigation of confined blasts, *Intern. J. of Mech. Sci.*, vol. 34, 6, pp 409-418, 1992
- [137] D. Schwer, K. Kailasanath, Blast mitigation by water mist – (1) Simulation of confined blast waves, Naval Research Laboratory, Technical Report, NRL/MR/6410-02-8636, 2002
- [138] A.G. Van Erkel, W. Haverdings, Simulation of internal blast inside ships and its subsequent damage analysis, Prins Maurits Laboratory TNO, Technical Report, 2004
- [139] J. Fourrier, A. Milne, Modelling of bunker trials with a water pool, Technical Report FGE Ltd, TR080/08, 2008

Partie III

Evaporation d'un nuage de gouttes

et

solution de modélisation du problème posé



Simulation CHYMERE du rejet brutal de liquide dans un volume V , avec échanges de masse et d'énergie entre phases – La phase liquide est en partie éjectée en dehors de V , vers l'extérieur

III.1 Motifs, objectifs et hypothèses initiales

III.1.1 Hypothèses initiales et intervalles d'études

L'analyse qualitative décrite en partie I laissait présager des conclusions formulées en fin de partie II : les phénomènes de changement de phase (et de combustion ou dégradation des produits chimiques) sont directement visibles, ou détectables, au travers de la séquence étudiée. Grâce à l'étude des signaux de pression interne à la chambre de tir, l'analogie effectuée avec les moteurs à explosion est à ce stade plus évidente.

On formule ici un court résumé des conclusions précédentes :

- Dans notre cas, la phase liquide (potentiellement réactive) se trouve libérée dans un environnement chaud ou surchauffé après un certain délai qui dépend de la configuration initiale (disposition des bidons). L'ordre de grandeur de ce délai est 10^{-3} s et le temps caractéristique associé est compris entre 5 et 20 ms selon la distance charge / conteneurs et une répartition initiale dans le bunker.
- Le liquide est dispersé dans la salle sous la forme d'un jet d'abord hautement dynamique (fragmentation importante), puis graduellement sous la forme d'un jet plein, gravitaire. La longueur de pénétration de ce jet est du même ordre que la longueur caractéristique du volume d'étude.
- L'interaction des ondes de choc avec le liquide en suspension ou réparti au sol, engendre un nuage de gouttes millimétriques, de gouttelettes très fines (quelques microns), voire d'éléments de plus grosse taille, isolés ou en paquets, lorsque le liquide est initialement stocké dans des réservoirs de grandes dimensions.
- La montée en pression et en température du milieu due à la détonation de la charge a un temps caractéristique compris dans l'intervalle [10, 40] ms selon le taux de chargement et la configuration initiale (facteur de forme, type d'explosif).
- Les niveaux de surpression quasi-statique sont compris dans l'intervalle [0,5, 27] bar, selon le type d'explosif et dans la gamme de taux de chargement [0.01 ; 0.6] kg/m³.
- Le champ de température est non uniforme sur une échelle de temps supérieure aux divers temps caractéristiques évoqués dans ce paragraphe. Il coexiste des zones « chaudes » et des zones « froides ».
- L'ordre de grandeur du temps de vidange total ou d'homogénéisation des variables thermodynamiques est la seconde (à l'échelle 1/8^e il faut 7s - pour une charge de 150 g dans 1,875 m³ - pour revenir à une pression ambiante). Le temps caractéristique de retour à la pression et à la température ambiante est supérieur à une minute, et comme l'ont montré les expérimentations à échelle réduite, à la fin du processus de mélange / vidange de la salle vers l'extérieur, il peut rester, selon la configuration initiale, des résidus liquides.

III.1.2 Rappel des objectifs de la modélisation

A partir de ces différents constats, cette troisième partie du mémoire doit permettre de donner des clefs de modélisation réduite du problème dans son ensemble.

Tout d'abord, on s'intéressera à la modélisation de l'évaporation d'une goutte liquide (ou d'un ensemble de gouttes) sous pression et température élevées, en prenant en compte les phénomènes de transferts de masse et d'énergie entre phases. Quelques cas test seront présentés afin de montrer l'importance de la notion de temps caractéristique sur la disparition d'une goutte soumise à un processus de chauffage puis d'évaporation.

Puis, dans un deuxième temps, un modèle 0D instationnaire de l'ensemble du scénario sera proposé. Ce modèle doit notamment prendre en compte, dans sa structure initiale, les échanges aux niveaux des parois de la pièce considérée, les flux de matière et d'énergie au niveau d'une brèche de faible surface vers l'extérieur, et les échanges de masse et d'énergie entre une phase liquide et une phase gazeuse (contenant a priori plusieurs espèces), réparties de manière arbitraire dans le volume d'étude. Les différents termes constitutifs des équations du modèle seront activés ou désactivés selon leur temps caractéristique ou les particularités du scénario (forte masse d'explosif, brèche de grandes dimensions, etc.).

Comme nous l'avons déjà évoqué, le modèle ainsi construit doit retranscrire une suite de phénomènes de transferts (et de flux convectifs) pilotés par les déséquilibres thermodynamiques entre phases. Ces phénomènes ont des temps caractéristiques longs par rapport aux phénomènes acoustiques. Les variations de durées courtes par rapport à l'échelle globale du problème, comme par exemple la propagation des ondes de choc dans le milieu, sont retranscrites de manière indirecte ou implicite au travers des termes sources des équations différentielles construites (évolution de la topologie de la phase liquide...).

III.2 Etat de l'art sur l'étude de l'évaporation d'un milieu liquide

III.2.1 Différents systèmes étudiés dans la littérature scientifique

L'évaporation d'un liquide à pression ambiante ou sous conditions thermodynamiques contraintes constitue un large domaine d'étude et couvre un large spectre d'applications. Dans le domaine des risques industriels, les modèles d'évaporation de flaques à pression ambiante forment une bibliothèque de termes source conséquente et sont le plus souvent issus de corrélations expérimentales. D'autres applications demandent de traiter de manière simultanée le phénomène de fragmentation et d'évaporation. C'est le cas par exemple des injecteurs pour les moteurs, des jets d'encre ou encore des moyens d'extinction d'incendie par sprinkler. Pour ces applications, la forme de la phase liquide est un jet constitué de gouttes dont la distribution en taille est mesurable (par technique optique) et reproductible.

La nature du liquide varie également très largement en fonction de l'application. Le tableau III.1 issu de [156] illustre ce propos pour quelques propriétés physiques et thermodynamique de liquides. Pour une goutte de 90 μm de diamètre, immergée dans un écoulement à 10 m/s, le nombre de Reynolds relatif à la goutte est de 1000 pour l'eau, de 660 pour l'éthanol, et de 1600 pour le n-heptane. Re reste du même ordre de grandeur pour ces trois produits car il en est de même pour le rapport ρ/μ . Par contre, pour le glycérol, Re est proche de 1 dans les mêmes

conditions. La littérature relative à l'évaporation évoque le plus souvent des résultats pour les fuels de type n-heptane, l'eau (produit évident de référence) et des alcools (éthanol).

Fluid	ρ [kg/m ³]	μ [mPa/s]	σ [mN/m]	T _{boil} @ 100kPa [°C]
Water	1000	0.890	71.99	99.6
Ethanol	789.2	1.074	21.97	78.0
Methanol	791.3	0.544	22.07	64.2
Glycerol	1261.3	934	62.5	287
Mercury		1.526	485.48	355.9
n-Heptane	683.7	0.387	19.65	98

Table 1-2 Fluid Properties for Investigations of Droplet Breakup in Shock Tubes. Density, viscosity and surface tension at standard temperature and pressure.

Tableau III.1 Données physico-chimiques de bases pour quelques produits liquides

Se trouvant à la base de nombreux systèmes, l'évaporation d'une goutte fait l'objet d'une littérature abondante depuis les travaux de référence de Spalding [147] et Godsave [148] (1953), puis au cours des années 1970 et 1980 [149 à 152]. Une goutte individuelle, le plus souvent supposée sphérique ou quasi sphérique, constitue en effet une géométrie de choix tant pour la modélisation que pour les approches expérimentales. Les « combustionnistes » ont ainsi multiplié les travaux de recherche en laboratoire sur le comportement individuel d'une goutte de carburant. Les articles publiés amènent toutefois la remarque suivante : même si les nombreux résultats expérimentaux suivent naturellement l'évolution des moyens de mesure (capacité croissante à traiter des systèmes multiphasiques complexes), deux grandes catégories de protocoles expérimentaux sont à distinguer, le premier consistant à étudier le comportement d'une goutte isolée ; le deuxième groupe étudiant des systèmes tels que les chambres de combustion de moteur (et injecteurs haute pression associés), les rejets accidentels de gaz liquéfiés, les rideaux d'eau, ou les nuages de gouttes, etc. Il y a entre ces deux bornes des zones d'ombres en ce qui concerne par exemple l'interaction entre gouttes : modifications des conditions d'écoulement en termes de concentrations d'espèces et de nombres de Reynolds locaux, coalescence de gouttes, effets collectifs, ...

Ces derniers phénomènes sont selon les auteurs et le système étudié, plus ou moins pris en compte ou retranscrits de manière indirecte dans les modèles d'évaporation, au travers de coefficients d'échanges de masse par exemple. Ceci conduit à la publication de nombreuses corrélations empiriques ou semi-empiriques, dont les domaines d'applications sont limités. A chaque système et modèle associé, il correspond un jeu de coefficients de transferts de masse et d'énergie.

III.2.2 Evaporation d'une goutte de liquide

De par l'abondance de résultats, nous nous focalisons tout d'abord sur l'évaporation d'une goutte liquide afin de présenter les grandes tendances en termes de modélisation de l'évaporation d'un produit chimique liquide et de restreindre nos investigations.

Selon l'application, une goutte peut se trouver dans un environnement simplement chaud ou dit surchauffé en fonction de la valeur de la température de travail par rapport à la température d'ébullition T_{eb} et la température critique T_{cr}. Cette discrétisation a été évoquée en partie I. La température du liquide est ici inférieure à celle de l'atmosphère de travail. La goutte est également en mouvement par rapport au milieu d'étude ce qui amplifie les échanges par convection à

l'interface liquide / gaz. Selon le diamètre initial de la goutte, le freinage par inertie de la sphère liquide demande une longueur et un temps conséquent.

Quels que soient les paramètres initiaux de l'écoulement, des phénomènes simultanés de transfert d'énergie et de masse entrent en jeu. Un flux de chaleur est appliqué à l'interface par conduction et par convection du côté gaz et du côté liquide. La vapeur dégagée est transférée vers le gaz par convection et diffusion. Selon le diamètre initial et les effets de couche limite, l'écoulement dans le liquide peut être un point clef et dimensionnant du problème (effet de recirculation).

Le taux d'évaporation d'une goutte dépend :

- de la pression, de la température et des propriétés de l'écoulement gazeux,
- de la température, du diamètre et des propriétés du liquide,
- de la vitesse relative de la goutte par rapport à l'écoulement.

Si on s'intéresse tout d'abord à la capacité du liquide à absorber l'énergie de l'écoulement gazeux, on peut séparer les nombreux travaux théoriques publiés en trois familles, liées à trois types de modèles :

- *Un modèle dit en D^2* . La température de la goutte est supposée uniforme et constante, toute la chaleur absorbée servant à évaporer le liquide,
- *Un modèle de conduction infinie*. La température à l'intérieur de la goutte est uniforme mais non constante,
- *Un modèle de conduction limitée*. Le profil de température dans la goutte n'est pas uniforme et dépend du temps.

Les hypothèses restrictives sont les suivantes :

- la goutte est sphérique et isolée,
- le processus d'évaporation est quasi-stationnaire,
- le liquide ne comprend qu'une seule espèce,
- le flux de chaleur par rayonnement est négligé,
- le processus de changement de phase se produit plus rapidement que le transport de la vapeur dans l'air ambiant, ce qui revient à supposer que la vapeur produite est à pression de vapeur saturante calculée à la température de surface de la goutte.

La figure III.1 illustre les trois modèles ci-dessus. Ces trois solutions ont fait l'objet de nombreuses comparaisons, tous paramètres égaux par ailleurs. On déduit facilement des articles et des hypothèses mêmes que des écarts entre modèles sur le temps d'évaporation (disparition de plus de 90% de la phase liquide) existent:

- ceux-ci sont de l'ordre de 10 % sans convection,

- de l'ordre de 20% avec convection.

Un modèle en D^2 revient à voir la goutte comme étant immédiatement aux conditions de saturation.

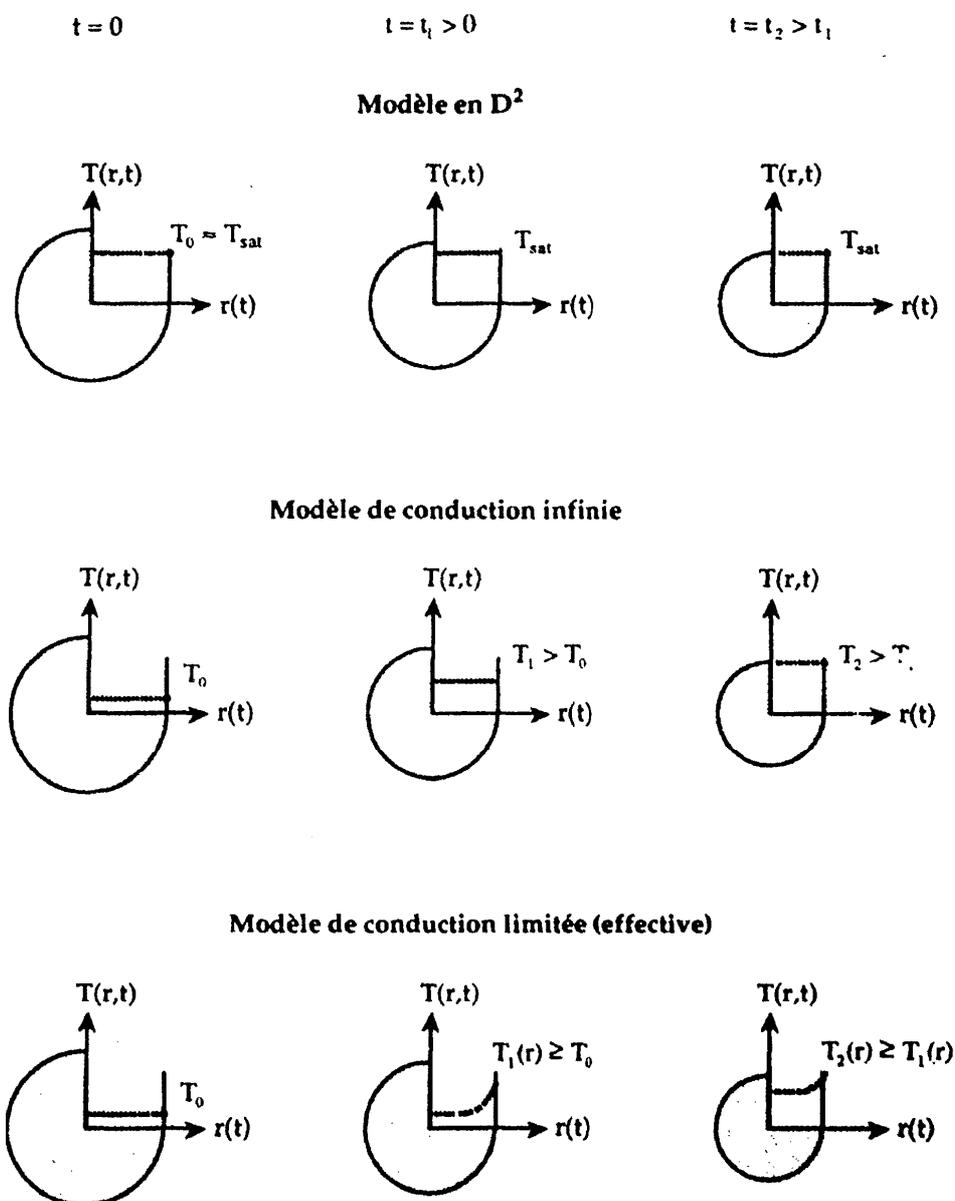


Figure III.1 Schémas de l'évolution de la température dans une goutte pour les différents modèles d'évaporation [165]

Il est également possible de classer les travaux de la littérature selon le diamètre initial de la goutte (ou une classe de diamètres). De nombreux auteurs [154 à 160] ont exploré le comportement de gouttes de diamètre inférieur à $20 \mu\text{m}$, pour lesquelles le nombre de Reynolds est proche de zéro tout au long de sa phase de vie (faible diamètre, faible inertie). Le comportement d'un tel objet est considéré comme étant bien connu et modélisé de manière fiable avec une hypothèse de symétrie sphérique. Plus précisément, les courants internes à la phase liquide sont en général négligés, ou traduits au travers des modèles de type conductivité effective ([165], cas particulier de la

conduction limitée, où la conductivité réelle du liquide est surestimée pour prendre en compte le transport de l'énergie par les courants internes).

Pour des diamètres supérieurs, de l'ordre de 80 à 100 μm , et pour des nombres de Reynolds dits « intermédiaires », une description plus détaillée de l'écoulement autour de la sphère est nécessaire pour traduire fidèlement les échanges de masse et d'énergie, côté gaz notamment. Les effets de couches limites et la répartition non homogène de la vapeur doivent être pris en compte. On parle le plus souvent d'*effet de film*, qui induit l'introduction de grandeurs thermodynamiques telles que la température de film, ou la masse volumique de film (grandeurs moyennes ou fonction de l'état à l'interface gaz / liquide et de l'état limite de l'écoulement). Selon le couple gaz / liquide étudié, et en fonction du nombre d'espèces présentes, la présence même de vapeur a une influence directe sur la vitesse de vaporisation du liquide.

Ces dernières remarques se traduisent par la construction de coefficients de transferts qui dépendent des caractéristiques de l'écoulement à « l'infini » (conditions limites) ou à l'interface.

Au final, les modélisations hydrodynamiques ou cinétiques de l'évaporation d'une goutte demandent de formuler dès le départ un certain nombre d'hypothèses en fonction de la distribution initiale de la taille des gouttes, des propriétés du liquide (température de vaporisation, température critique, chaleur latente de vaporisation), et des conditions d'écoulements (vitesse relative, température et pression moyennes, etc.).

La simulation numérique directe des transferts de masse et d'énergie du côté gaz et du côté liquide est encore aujourd'hui coûteuse en temps de calcul. Ces mêmes hypothèses permettent de réduire ce coût mais limitent le champ d'application des résultats, tout comme elles réduisent les domaines de validité des modèles cinétiques.

III.2.3 Travaux fondamentaux ayant servis de base à notre étude

De la bibliographie abondante nous avons retenu les travaux suivants, répartis en deux groupes.

Tout d'abord, les articles de Renkiszbulut et al. [180 à 182] de l'Université de Waterloo au Canada. Ces travaux recensent de manière exhaustive les différentes corrélations portant sur le transfert de masse à l'interface entre une goutte liquide en mouvement et un gaz, selon les conditions initiales du problème. L'auteur tente de généraliser, tout en divisant le large spectre d'étude en sous domaines, les lois de corrélation basées sur le nombre de Sherwood, nombre sans dimension.

En effet, par analogie aux modèles de transferts thermiques, il est possible d'exprimer le débit massique en fonction de nombres sans dimensions. Il existe de nombreuses lois basées sur le nombre de Nusselt Nu qui décrivent les transferts thermiques au niveau de la paroi d'une plaque, d'un cylindre ou d'une sphère immergé dans un écoulement laminaire ou turbulent.

Le nombre de Nusselt Nu est une fonction des nombres de Reynolds Re et de Prandtl Pr .

$$Nu = f(Re, Pr)$$

Le nombre de Prandtl relie des caractéristiques intrinsèques au milieu considéré, alors que le nombre de Reynolds traduit les caractéristiques de l'écoulement. Les différents nombres sans dimensions utilisés traduisent l'importance relative des différents mécanismes de diffusion ou de convection :

$$Pr = \frac{\text{diffusion de la quantité de mouvement}}{\text{diffusion thermique}}$$

$$Re = \frac{\text{flux convectif de quantité de mouvement}}{\text{flux diffusif de quantité de mouvement}}$$

$$Nu = \frac{\text{flux de chaleur en présence de convection}}{\text{flux de chaleur diffusif en l'absence de convection}}$$

En suivant alors une démarche analogue, on construit le nombre de Sherwood Sh tel que :

$$Sh = g(Re, Sc),$$

où Sc est le nombre de Schmidt :

$$Sc = \frac{\text{diffusion de la quantité de mouvement}}{\text{diffusion de la masse}}$$

Les fonctions f et g sont déterminées soit par analyse asymptotique des équations de la dynamique des phases (théorie des couches limites), soit expérimentalement. Classiquement, le nombre de Sh s'exprime sous la forme :

$$Sh E_M = a + b.Sc^c . Re^d$$

Où E_M est une fonction représentative du rapport des forces gouvernant l'évaporation sur celles qui s'y opposent traduisant les effets de film. Dans cette expression, les propriétés thermo-physiques des fluides sont exprimées à une température de référence en général différente de la température de surface de la goutte. Ce type de formulation donne plusieurs possibilités au modélisateur et permet de « traduire » ou de corriger de manière implicite les variations des taux de transfert au cours de l'évolution du système, en jouant sur la valeur de la température de référence, tout comme sur les valeurs de E_M et b (a , c et d étant en toute rigueur théoriquement déterminées). E_M s'exprime en fonction du nombre de masse ou nombre de Spalding et traduit l'écart local de concentration d'une espèce. E_M varie au cours de l'évaporation et selon les propriétés de l'écoulement entre 0.7 et 1. L'effet de film est en général pris en compte lorsque la température de travail est élevée, supérieure aux températures caractéristiques du liquide, pour prendre en compte les effets dynamiques dits de flash ou « boiling » (ébullition) liés à la propagation du front d'évaporation et, lorsque $T > T_{cr}$, la participation de la vapeur au processus de chauffage.

La formulation proposée au chapitre suivant diffère de ce point de vue des travaux de la littérature, en se basant uniquement sur la valeur de la température à l'interface gaz / liquide. Le modèle proposé ne nécessite pas de faire appel explicitement à la fonction correctrice E_M . On rappelle aussi ici que lors d'une explosion à volume constant, si localement le liquide se trouve immergé dans un gaz à température supérieure à sa température d'ébullition, voire sa température critique, la pression (quasi-statique) du gaz reste inférieure à la pression critique du liquide.

Bien que datant des années 1990, ces articles restent d'actualité car les efforts des scientifiques du domaine se sont depuis principalement portés sur la simulation numérique directe des écoulements et sur l'analyse du coût des différents types de modèle. La simulation numérique

directe de l'écoulement côté liquide a également permis de conforter les corrélations ci-dessus et de quantifier l'importance des courants internes à la goutte.

On retiendra pour la suite de nos travaux l'expression du nombre de Sherwood suivante, avec pour coefficients $a = 2$, $b = 0,6$, $c = 1/3$ et $d = 1/2$:

$$Sh = 2 + 0.6.Sc^{1/3}.Re^{1/2}$$

Ce choix se justifie notamment par la solution de modélisation que nous développerons par la suite et par notre objectif d'obtenir une écriture généraliste du problème et de diminuer le nombre initial de sources d'incertitudes.

Le deuxième groupe de références comporte les articles et publications récentes de Sazhin et al., de l'Université de Brighton au Royaume-Uni (School of Engineering, Faculty of Science and Engineering). Dans la continuité des publications de référence d'Abramzon [151 et 170], les scientifiques de ce groupe s'intéressent aux solutions de modélisation instationnaire de l'évaporation de gouttes de liquide, de manière isolée ou au sein d'un système dans lequel l'évaporation est associée aux phénomènes de fragmentation dynamique, puis de combustion. Les articles retenus ont été publiés entre 2001 et 2007 [168 à 179].

Les applications évidentes et d'actualité étant la combustion de tout type de carburant et l'optimisation du fonctionnement des moteurs. Les liquides étudiés et utilisés comme références sont les carburants de type n-heptane, n-dodécane, tétradécane, etc. Les auteurs s'attardent en premier lieu sur les phases primordiales de chauffage du liquide qui, dans un moteur, est injecté « froid » dans une atmosphère chauffée ou surchauffée. Avant de pouvoir s'évaporer, le liquide absorbe de l'énergie et atteint au bout d'un délai non négligeable les conditions de saturations à la frontière liquide / gaz.

Dès lors, Sazhin et al. proposent dans les références [171, 176] une modélisation 0D de l'échauffement d'une goutte de liquide, en prenant en compte les échanges conductifs et convectifs. Le domaine d'étude couvre des surpressions maximales de l'ordre de 40 bars et des températures de la phase gaz comprises entre 500 et 1500 K. Là encore, au sein du système d'équations différentielles, les choix de modélisation diffèrent de notre approche en introduisant les termes correctifs évoqués plus haut et une température de référence différente de la température à l'interface G/L.

Les auteurs mettent également en évidence l'importance de la connaissance des propriétés des liquides tels que la dépendance de la température de saturation vis-à-vis de la pression, ou bien encore les variations de la chaleur latente de vaporisation en fonction de ces mêmes grandeurs thermodynamiques. Les efforts de modélisation consentis au niveau des coefficients d'échanges peuvent être contrecarrés si l'on ne prend pas une description adéquate de ces grandeurs sur le domaine d'étude. Par exemple, différents auteurs utilisent une variation polynomiale de la chaleur latente de vaporisation en fonction de T, et/ou des fonctions exponentielles et/ou polynomiales pour décrire $P_{sat}(T)$.

Au travers des différentes solutions de modélisation recensées, une physique complexe se trouve traduite par des équations relativement simples. Malgré les distinctions effectuées – selon la taille des gouttes ou la température de travail – les processus physiques dans les phases liquides et gaz sont toujours étroitement liés. Une solution communément retenue revient cependant à

considérer un modèle quasi-stationnaire « côté gaz » et des processus transitoires seulement dans la phase liquide. Ces solutions s'appuient notamment sur le fait que la conductivité thermique d'un liquide est supérieure à celle d'un gaz. Par contre la diffusivité thermique du gaz est en général très supérieure à celle d'un liquide.

Les figures III.2 et III.3 sont issues de la référence [174]. L'auteur y présente, sur un cas test, l'influence du choix de la modélisation des échanges thermiques et massiques côté gaz et de la description du champ de température dans la goutte.

Comme nous l'avions déjà formulé, les auteurs arrivent à la conclusion qu'en absence de convection (ou convection faible), l'écart sur le temps de vie d'une goutte est inférieur à 10 % selon le choix de la répartition de la température au sein du liquide. Par contre, selon le type de corrélation retenu pour les nombres de Sh et Nu relatifs à l'écoulement, il y a une « large » dispersion des résultats : sur la figure III.3, Sazhin et al. comparent les résultats de 7 modèles, en prenant un modèle de conductivité effective côté liquide. Les sept modèles diffèrent les uns des autres par la prise en compte de nombres de Spalding plus ou moins complexes. Par exemple, le modèle 0 n'introduit aucune correction sur Sh mais seulement sur Nu alors que les modèles 4, 5 et 6 nécessitent l'introduction de différentes fonctions correctrices. Ces fonctions ne sont pas détaillées ici car le propos est de montrer la dispersion possible des résultats selon la solution de modélisation choisie. Au final, on constate sur la figure III.2 que pour une goutte de 10 μm immergée dans un écoulement à 880 K et sous 30 bar, le temps de vie prend des valeurs comprises entre 1,8 et 2,12 ms soit un écart relatif de 15%. De même, pour une goutte de 50 μm , dans des conditions identiques, le temps de vie est compris entre 35 ms (pour le modèle 0) et 42,5 ms (pour le modèle 6). **Si l'écart relatif reste du même ordre de grandeur, il va de soi que plus le diamètre initial est élevé, plus la dispersion sur le temps de vie est grande.** Nous avons qualifié cette dispersion de large : ce terme doit être bien entendu relativisé si l'on compare ces résultats aux nombreuses sources d'erreur inhérentes au problème que nous avons à traiter.

Néanmoins, on peut compléter cette analyse en comparant les résultats d'une modélisation $0D(t)$ avec des résultats expérimentaux de l'évaporation de gouttelettes de n-heptanes, pour 4 températures d'écoulement différentes. **La figure III.3 montre que plus cette température est élevée, plus la dispersion des résultats de modélisation est importante. L'écart entre les résultats expérimentaux et les résultats des modèles suit la même tendance.** Au final, dans ce cas précis, une solution de type « distribution parabolique de T » côté liquide associée à un modèle sans correction de Sh et Nu côté gaz semble être la plus stable et traduit fidèlement les résultats expérimentaux sur un large intervalle de température.

On note par ailleurs que si la valeur finale de la température de surface ainsi calculée est cohérente quel que soit le modèle, il n'en est pas de même tout au long du processus : les écarts entre modèles sont maximaux à la fin du processus de chauffage. Cette température n'est cependant pas validée expérimentalement.

Les auteurs se penchent également sur la prise en compte du rayonnement et les solutions simples associées [169,177]. Le rayonnement thermique se traduit dans l'équation de conduction de la chaleur par la prise en compte d'un terme source supplémentaire Q_R . Si le rayonnement est uniformément absorbé par le liquide considéré comme optiquement mince, ce terme source peut s'exprimer simplement grâce à la loi de Stefan-Boltzmann, en fonction du diamètre de la goutte et de la température de l'écoulement à la puissance quatrième. Les auteurs abordent également le cas d'une absorption radiale du rayonnement selon les propriétés optiques du liquide. Dans les deux

cas, les résultats de la simulation conduisent aux mêmes conclusions, illustrées par les figures III.4 et III.5 : la prise en compte du rayonnement induit une réduction drastique du temps de vie de la phase liquide, et une forte variation du taux de vaporisation (accélération au début de l'évaporation). Ces formulations nécessitent toutefois deux informations : premièrement de connaître les propriétés optiques du liquide afin de proposer un modèle réaliste, deuxièmement, d'effectuer une hypothèse lourde de conséquence sur la valeur de la température de « surface » ou de référence en présence de rayonnement. Compte-tenu des capacités de validation expérimentales, il s'agit plus ici de l'introduction d'un nouveau paramètre que d'une valeur clairement définie.

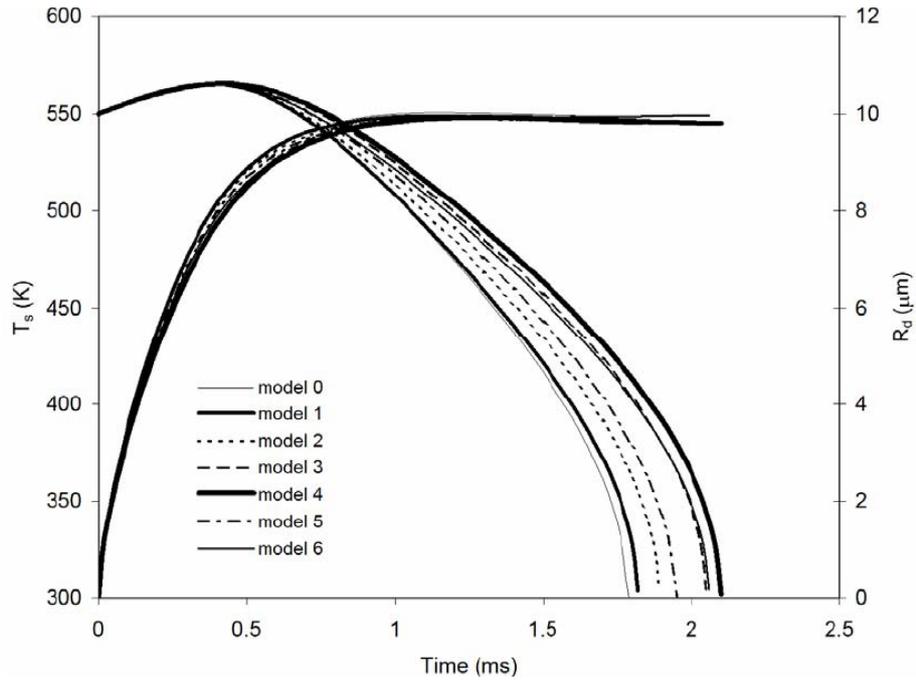


Fig. 1 Plots of T_s and R_d versus time for the initial gas temperature $T_{g0} = 880$ K, gas pressure $p_{g0} = 3$ MPa, droplet temperature $T_{d0} = 300$ K, radius $R_{d0} = 10 \mu\text{m}$ and velocity $v_{d0} = 1$ m/s. The overall volume of injected liquid fuel was taken equal to 1 mm^3 , and the volume of air, where the fuel was injected, was taken equal to 883 mm^3 . The results were obtained based on the effective thermal conductivity (ETC) model, the analytical solution of the heat conduction equation, and using seven gas phase models. The effects of thermal radiation are ignored.

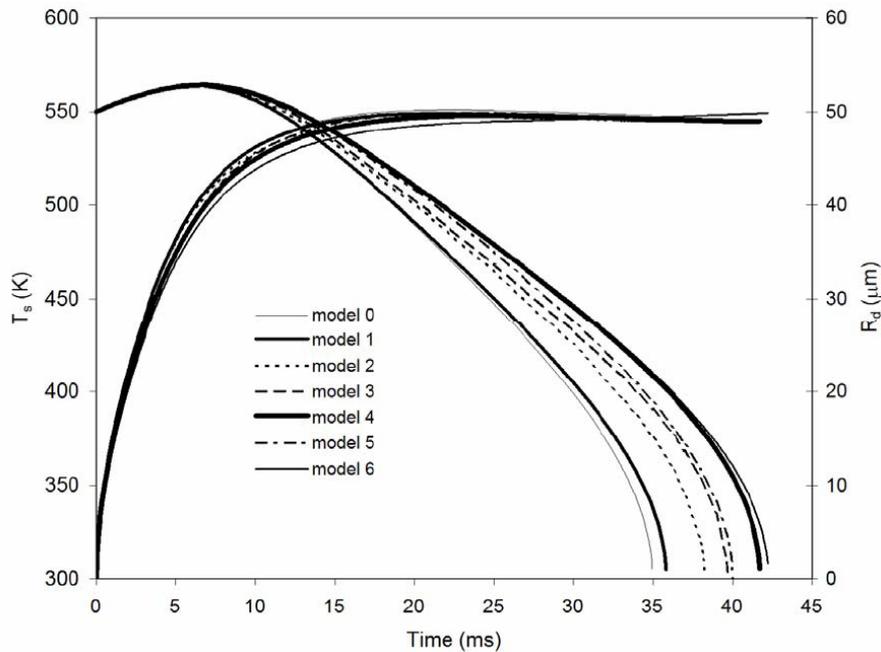


Fig. 3 The same as Fig. 1 but for the initial droplet radius equal to $50 \mu\text{m}$.

Figure III.2 comparaison des différents modèles « côté gaz » sur un cas test, et une conductivité effective « côté liquide ». En haut, réseau de courbes pour une goutte de faible dimension, en bas, goutte de dimension supérieure

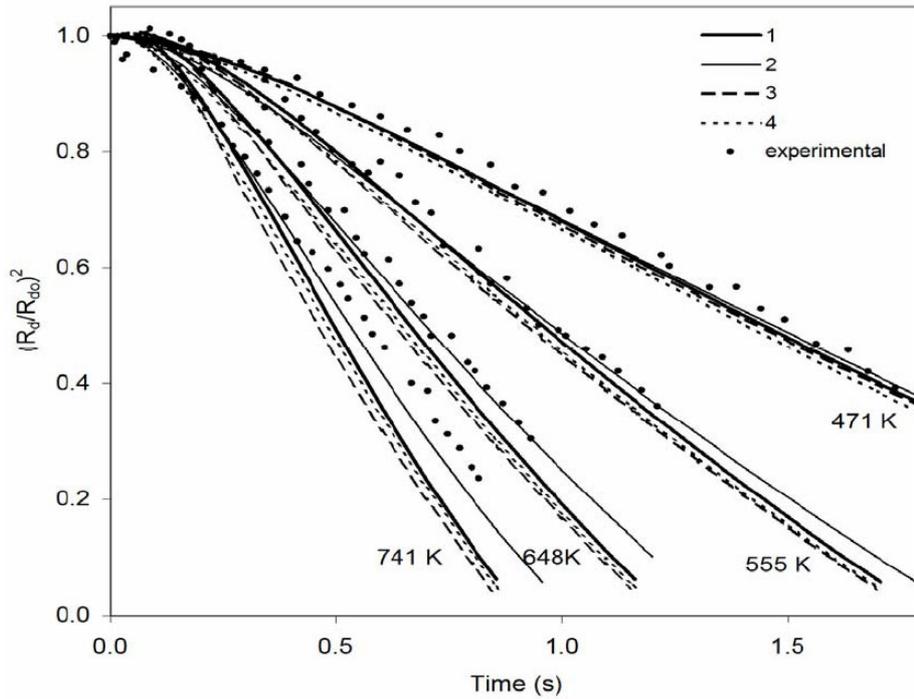


Fig. 12 The values of $(R_d/R_{d0})^2$ for evaporating n-heptane droplets versus time for the initial pressure of 0.1 MPa, as measured by Nomura et al [53], and the results of calculations for the same combination of liquid and gas models as in Fig. 11. The values of the initial gas temperatures 471 K, 555 K, 647 K and 741 K are indicated near the plots.

Figure III.3 Comparaison expériences / calculs pour une goutte de n-heptane selon la température de l'écoulement

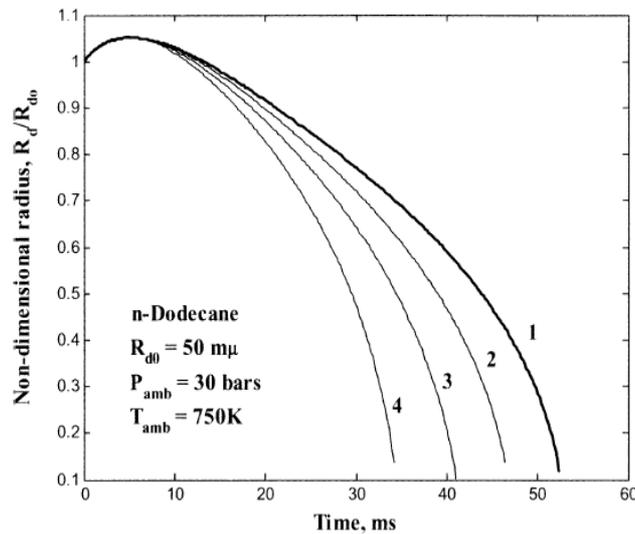


Fig. 1. Normalized radius of a diesel fuel (*n*-dodecane) droplet versus time at various external temperatures, T_{ext} , as predicted by the 'extended' model with the distributed radiation absorption, for $R_{d0} = 50 \mu\text{m}$, $T_0 = 300 \text{ K}$, $T_\infty = 750 \text{ K}$, $p_\infty = 30 \text{ bar}$ and $U_{rel,0} = 15 \text{ m/s}$. Curve 1 refers to the case without radiation; curve 2 refers to the case when $T_{ext} = 1000 \text{ K}$; curve 3 refers to the case when $T_{ext} = 1250 \text{ K}$; curve 4 refers to the case when $T_{ext} = 1500 \text{ K}$.

Figure III.4 Prise en compte du rayonnement dans les modèles d'évaporation : comparaison des résultats selon les températures extérieures supposées

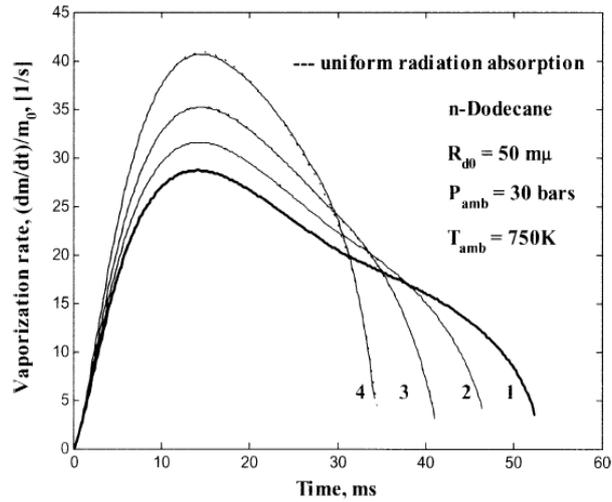


Fig. 2. Normalized vaporization rate of a diesel fuel (*n*-dodecane) droplet versus time at various external temperatures, T_{ext} , as predicted by the 'extended' model with the distributed radiation absorption, for $R_{d0} = 50 \mu\text{m}$, $T_0 = 300 \text{ K}$, $T_\infty = 750 \text{ K}$, $p_\infty = 30 \text{ bar}$ and $U_{rel,0} = 15 \text{ m/s}$. Curve 1 refers to the case without radiation; curve 2 refers to the case when $T_{ext} = 1000 \text{ K}$; curve 3 refers to the case when $T_{ext} = 1250 \text{ K}$; curve 4 refers to the case when $T_{ext} = 1500 \text{ K}$. Dashed curves refer to the cases of uniform radiation absorption.

Figure III.5 Prise en compte du rayonnement dans les modèles d'évaporation : comparaison des résultats selon les températures extérieures supposées – taux de vaporisation

III.2.4 Position de l'étude par rapport aux travaux de la littérature

Cette courte analyse sur l'évaporation d'un liquide sous pression et température élevées, nous conduit à éclaircir la position de notre étude et à introduire les solutions de modélisation que nous avons retenues.

Nous devons prendre en compte des phénomènes aux temps caractéristiques hétérogènes, le ratio du temps maximal sur le temps minimal étant de l'ordre de 10^6 s. Le rapport de la taille maximale sur la taille minimale initiale des éléments liquides à considérer donne le même ratio. Plus généralement, la phase liquide peut être vue comme un ensemble d'éléments de topologie quelconque. La masse de liquide et la masse de gaz présentes dans le système sont du même ordre de grandeur (après détonation de la charge explosive). La structure du modèle doit retranscrire les mécanismes qui sont à l'origine de l'évaporation d'une phase liquide, dans un environnement gazeux, en fonction de sa topologie initiale et en présence simultanée d'écart de température et de concentration massique. Un couplage conservatif doit être envisagé entre les deux phases.

Le changement de phase du liquide se produit :

- Par apport de chaleur extérieur, dans une ambiance quasi constante, via une interface liquide/gaz, le gaz étant plus chaud que le liquide.

Rq : le liquide peut aussi être surchauffé : dans ce cas c'est le flux de chaleur du cœur du liquide vers l'interface qui produit l'évaporation.

- Par gradients de concentration.

On se focalise sur les transferts de masses basés sur des mécanismes diffusifs :

- Diffusion de la chaleur aux interfaces,
- Diffusion moléculaire des différentes espèces chimiques.

Dans l'approche décrite dans ce mémoire, deux différences notables apparaissent dès ce stade par rapport aux modélisations de la littérature : les mécanismes d'évaporation par gradients de température et de concentration sont considérés simultanément. La phase liquide n'est pas immédiatement à saturation. Le délai de chauffage du liquide jusqu'à cette température est pris en compte.

Les hypothèses suivantes sont également formulées :

- pour un élément liquide sphérique, le gradient de température interne à la goutte est représenté dans un premier temps par une loi parabolique. La température est une fonction polynomiale de r de degré 2, où r est la distance par rapport au centre. On introduira ensuite une solution approchée de l'équation de la chaleur.
- Les phases en présence sont constituées de plusieurs espèces i .
- On ne prend pas en compte l'effet du rayonnement thermique.

L'écriture du modèle repose sur la transcription des équations de conservation au niveau de l'interface I entre la phase gaz et la phase liquide, par changement de repère pour l'expression des vitesses et par l'intégration sur I des relations de saut. Cette opération va faire apparaître les grandeurs T_I , température à l'interface, et A_I , l'aire interfaciale totale.

On considère également une écriture générique des nombres de Sherwood Sh et de Nusselt Nu sans prendre en compte a priori leur dépendance vis-à-vis de la concentration de vapeur (i.e. du nombre de masse) au niveau de l'interface I. Ce choix se justifie d'une part par l'analyse de la bibliographie, et d'autre part par le fait que l'on souhaite couvrir des larges gammes de température, pression, vitesse d'écoulement et de longueur caractéristique de la phase L.

III.3 Equations de la dynamique d'un écoulement multiphasique et notion d'interface

III.3.1.Éléments mathématiques utilisés

On décrit tout d'abord les fonctions et transformations mathématiques nécessaires à nos travaux de modélisation.

III.3.1.1 Fonction indicatrice

On définit en premier lieu une fonction indicatrice X_k de la phase k afin de sélectionner la phase concernée par les équations mis en jeu. La fonction indicatrice de la phase k , X_k appelée aussi fonction de phase, est définie de la manière suivante :

$$X_k(M,t) = \begin{cases} 1 & \text{si } M \text{ appartient à la phase } k \\ 0 & \text{dans le cas contraire} \end{cases}$$

Cette fonction obéit à la loi d'évolution suivante :

$$\frac{\partial X_k}{\partial t} + \vec{u}_I \cdot \nabla X_k = 0$$

où \vec{u}_I représente la vitesse *locale* de l'interface. Il s'agit d'une équation de transport, la vitesse d'advection étant précisément le vecteur \vec{u}_I . X_k est constant le long des trajectoires des interfaces et permet de suivre une particule de la phase k dans son mouvement.

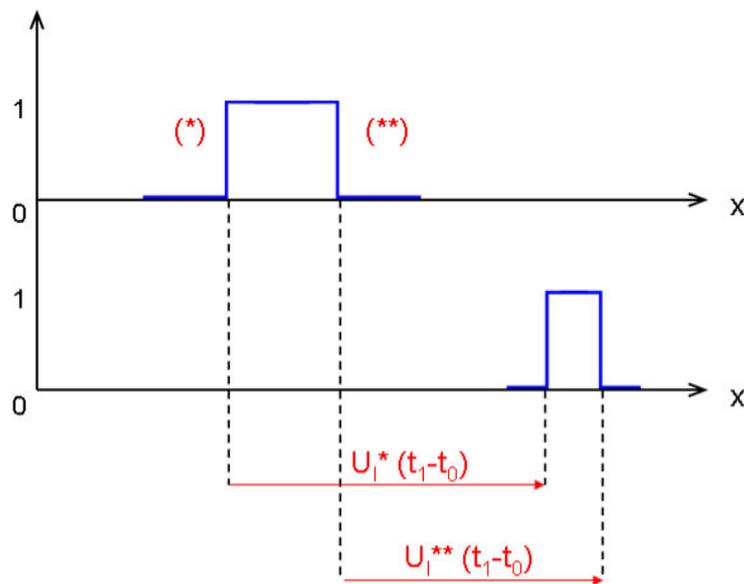


Figure III.6 Diagramme de marche de la propagation d'une phase k, les interfaces ayant deux vitesses différentes

Le gradient ∇X_k est différent de zéro uniquement aux interfaces et définit la position de l'interface localement. Les produits $f \nabla X_k$ définissent la valeur f_i de la fonction f considérée aux interfaces. L'utilisation d'une telle fonction et les propriétés mathématiques associées (commutation avec les

opérateurs de dérivation et d'intégration par exemple) sont évoquées et détaillées dans les références [140,141].

Si X_k est une fonction continue, on peut décider que le changement de fluide s'effectue à une valeur arbitraire de X_k , 0,5 par exemple. On a alors translation du profil déformé :

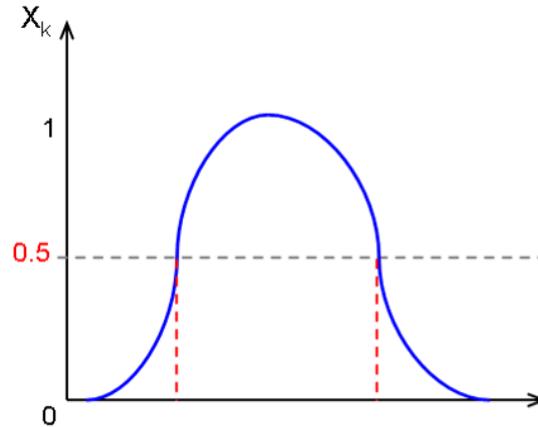


Figure III.7 Représentation d'une fonction de phase continue définie par une valeur seuil de 0,5

Numériquement, une telle méthode de sélection n'introduit pas de diffusion des interfaces. Si maintenant X_k est une fonction régulière dans un espace à deux dimensions (x,y) , X_k variant toujours entre 0 et 1,

$$dX_k = \frac{\partial X_k}{\partial x} dx + \frac{\partial X_k}{\partial y} dy$$

$$\text{et } d\vec{M} = dx.\vec{i} + dy.\vec{j}$$

Le gradient de X_k s'écrit alors, $\vec{\nabla}X_k = \frac{\partial X_k}{\partial x} \vec{i} + \frac{\partial X_k}{\partial y} \vec{j}$ avec $dX_k = \vec{\nabla}X_k . d\vec{M}$

Si l'on se déplace le long d'une ligne de niveau (figure III.8), comme X_k est une constante,

$$dX_k = \vec{\nabla}X_k . d\vec{M} = 0$$

$$\vec{\nabla}X_k \perp d\vec{M}$$

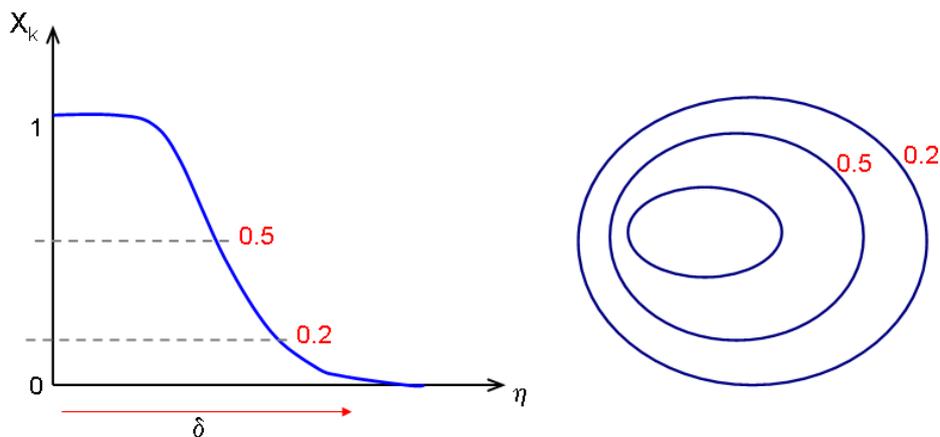


Figure III.8 Fonction de phase régulière et variation le long d'une direction donnée

Le gradient de X_k représente donc la normale à l'interface. Si on se déplace maintenant le long d'une normale, et on désigne par η la coordonnée correspondant au déplacement (figure III.8). On peut écrire :

$$\frac{\partial X_k}{\partial \eta} = \frac{0-1}{\delta} \cdot \vec{\eta} = \frac{-1}{\delta} \vec{\eta}$$

où δ représente l'étalement de X_k . $\vec{\nabla} X_k$ est donc une normale "entrante". On peut définir alors le vecteur normal sortant, normé, relatif à la phase k , à partir du gradient de X_k

$$\vec{n}_k = \frac{-\vec{\nabla} X_k}{\|\vec{\nabla} X_k\|}$$

Les résultats ci-dessus sont également valables pour des fonctions de distribution discontinue. On s'intéresse maintenant à l'intégrale sur un volume V du produit scalaire $\vec{\nabla} X_k \cdot \vec{n}_k$. Nous verrons que l'intégrale de ce produit est liée à l'aire interfaciale, grandeur particulièrement importante dans les écoulements diphasiques. Pour simplifier, prenons l'exemple d'un milieu répondant au schéma ci-dessous:

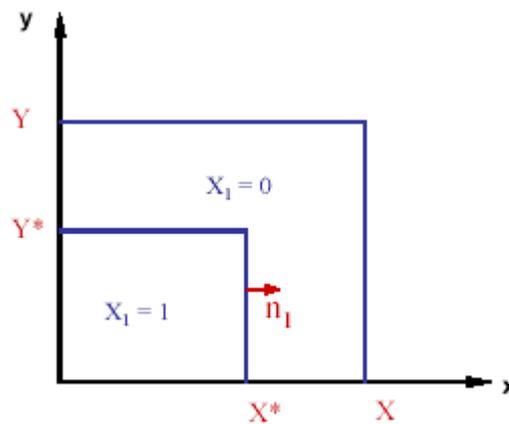


Figure III.9 Exemple de distribution de deux phases séparées par une interface

En présence de 2 phases, la phase 1 étant délimitée dans le plan (x,y) par les segments Y^* et X^* , la phase 2 occupant l'espace restant. X_1 est égal à 1 dans la phase 1, 0 ailleurs. Le vecteur \vec{n}_1 est la normale sortante le long de l'interface 1 - 2. Alors,

$$\int_V \vec{\nabla} X_k \cdot \vec{n}_k dv = \int_0^Y \int_0^{X^*} \left(\frac{\partial X_k}{\partial x} \vec{i} + \frac{\partial X_k}{\partial y} \vec{j} \right) \cdot \vec{n}_k dx dy = \int_0^Y [X_k]_0^{X^*} dy + \int_0^{X^*} [X_k]_0^{Y^*} dx$$

$$\int_V \vec{\nabla} X_k \cdot \vec{n}_k dv = -(Y^* + X^*) = -A_I$$

avec A_I la surface (le périmètre en 2D) de l'interface entre le milieu 1 et le milieu 2. Ce résultat est généralisable à une topologie quelconque. On retiendra au final,

$$\int_V \vec{\nabla} X_k \cdot \vec{n}_k dv = -A_I$$

III.3.1.2 Autres outils d'intégration utilisés

On définit également l'opérateur suivant :

$$\langle f \rangle = \frac{1}{V} \int_V f dV$$

avec f une grandeur arbitraire de l'écoulement. Il s'agit de la moyenne volumique de f sur le volume d'intégration V .

La moyenne volumique de X_k , $\langle X_k \rangle$, représente la fraction volumique de la phase k , α_k , qui est une grandeur essentielle et couramment utilisée en modélisation des écoulements multiphasiques.

De même, on définit \bar{g}_k la moyennephasique d'une grandeur g sur V_k :

$$\bar{g}_k = \frac{1}{V_k} \int_{V_k} g dV$$

Enfin, nous aurons recours au théorème de Gauss – Ostrogradsky, qui, pour un vecteur \vec{g} dont les coordonnées sont des fonctions de (x,y,z) continûment dérivables sur son domaine de définition, donne l'égalité :

$$\int_V \text{div}(\vec{g}) dV = \int_S \vec{g} \cdot \vec{n} dS$$

où S est la surface totale délimitant V et \vec{n} le vecteur normal sortant à la surface S .

Ces différents outils topologiques et mathématiques seront utilisés dans la suite de cette partie III pour la détermination notamment des transferts entre phases. Ces transferts sont régis par les relations de saut à l'interface entre deux phases pures. On va donc tout d'abord rappeler les équations qui gouvernent la dynamique des phases pures.

III.3.2 Equations de la dynamique des phases pures

Le comportement des phases en présence est régi par les équations de la mécanique des fluides, pour un milieu compressible :

- Equation de conservation de la masse,
- Equation de conservation de la quantité de mouvement,
- Equation de conservation de l'énergie.

Ces trois équations sont écrites ici pour un écoulement à k phases et i espèces.

III.3.2.1 Equation de conservation de la masse

On note Y_{ki} la fraction massique de l'espèce i dans la phase k et D_{ki} le coefficient de diffusion massique de cette espèce. La diffusion des espèces est pilotée par la loi de Fick, qui relie le flux de matière au gradient de fraction massique selon l'équation :

$$\vec{J}_{ki} = -\rho_k D_{ki} \vec{\nabla} Y_{ki}$$

L'équation de conservation de la masse de l'espèce i dans la phase k s'écrit alors:

$$\frac{\partial \rho_k Y_{k,i}}{\partial t} + \text{div}(\rho_k Y_{k,i} \vec{u}_k - \rho_k D_{ki} \vec{\nabla} Y_{ki}) = 0$$

en absence de toute production chimique.

Comme, $\sum_i Y_{ki} = 1$ et par hypothèse, $D_{ki} = D_k \forall i \in \text{phase } k$, en sommant sur i les équations de conservation de la masse des espèces i , l'équation de masse du mélange dans la phase k s'écrit :

$$\frac{\partial \rho_k}{\partial t} + \text{div}(\rho_k \vec{u}_k) = 0$$

III.3.2.2 Equation de conservation de l'énergie

A l'intérieur de la phase k , toutes les espèces chimiques évoluent avec la même température T_k . Pour déterminer cette variable, on utilise l'équation de conservation de l'énergie de la phase k écrite en termes d'énergie totale :

$$\frac{\partial \rho_k E_k}{\partial t} + \text{div}((\rho_k E_k + p_k) \vec{u}_k + \vec{q}_k) = \overline{\tau}_k : \vec{\nabla} \vec{u}_k$$

E_k représente l'énergie totale de la phase k : $E_k = e_k + \frac{1}{2} \vec{u}_k \cdot \vec{u}_k$, où e_k est l'énergie interne et

$$e_k = \sum_i Y_{ki} \cdot e_{ki}(T_k, P_k)$$

\vec{q}_k représente le flux de chaleur diffusif dans la phase k et s'écrit :

$$\vec{q}_k = -\lambda_k \vec{\nabla} T_k - \rho_k D_k \sum_i h_{ki} \vec{\nabla} Y_{ki} + \vec{q}_R$$

Le premier terme traduit la loi de Fourier et la diffusion de la chaleur par gradient de température. Le deuxième terme correspond au transfert d'enthalpie par diffusion des espèces.

D'autre part, on néglige la production d'énergie par dissipation visqueuse par rapport au flux diffusif. Le produit du tenseur visqueux et du tenseur des vitesses est donc considéré comme nul. L'équation de conservation de l'énergie dans la phase k devient :

$$\frac{\partial \rho_k E_k}{\partial t} + \text{div}((\rho_k E_k + p_k) \vec{u}_k + \vec{q}_k) = 0$$

Pour les relations de saut que nous établirons au chapitre suivant, au niveau de l'interface entre deux phases, on supposera que l'écoulement est localement isobare. Cette hypothèse revient à négliger les variations de pression dans l'équation de conservation de l'énergie totale.

Dans un premier temps également, nous ne prenons pas en compte les flux de chaleurs d'origine radiative. Cette hypothèse sera critiquée par la suite.

$$\vec{q}_R = \vec{0}$$

III.3.2.3 Equation de conservation de la quantité de mouvement

En considérant à nouveau les fluides en présence comme non visqueux, sans force extérieure, l'équation de conservation de la quantité de mouvement de la phase k s'écrit :

$$\frac{\partial \rho_k \bar{\mathbf{u}}_k}{\partial t} + \text{div}(\rho_k \bar{\mathbf{u}}_k \otimes \bar{\mathbf{u}}_k) + \bar{\nabla} p_k = \bar{\mathbf{0}}$$

Cette équation s'avèrera inutile car remplacée par la condition d'isobaricité.

III.3.2.4 Changement de repère

En écrivant les mêmes équations dans le repère d'une l'interface qui se déplace à la vitesse $\bar{\sigma}$ constante, on va obtenir le même système car ces équations sont invariantes par transformation galiléenne. La seule modification intervient au niveau de la vitesse, qui est maintenant exprimée dans le repère de l'interface. Ainsi les équations s'écrivent :

$$\frac{\partial \rho_k Y_{ki}}{\partial t} + \bar{\nabla} \cdot (\rho_k Y_{ki} \hat{\mathbf{u}}_k - \rho_k D_k \bar{\nabla} Y_{ki}) = 0$$

$$\frac{\partial \rho_k E_k}{\partial t} + \bar{\nabla} \cdot (\rho_k H_k \hat{\mathbf{u}}_k + \bar{\mathbf{q}}_k) = 0$$

Avec H_k l'enthalpie totale de la phase k,

$$H_k = E_k + \frac{P_k}{\rho_k}$$

Et en faisant apparaître le vecteur vitesse dans le repère lié à l'interface :

$$\hat{\mathbf{u}}_k = \bar{\mathbf{u}}_k - \bar{\sigma}$$

III.3.3 Relations de saut à une interface I entre un liquide et un gaz

On considère maintenant l'écoulement d'un gaz et d'un liquide de part et d'autre d'une interface I au travers de laquelle vont se produire des échanges de masse, de quantité de mouvement et d'énergie.

On suppose tout d'abord que l'écoulement au niveau de I est isobare (et seulement au niveau de I). On suppose aussi que les énergies cinétiques dues au transfert de masse sont négligeables par rapport aux énergies internes. En effet, un front d'évaporation se propage en général à très faible vitesse, de l'ordre de celle de la vitesse de diffusion de la chaleur ou de la diffusion de masse (inférieure au mm/s). De part et d'autre de ce front, mais aussi à travers lui, se propagent des ondes acoustiques nettement plus rapides (de l'ordre de 1000 m/s). La rapidité de ces ondes a pour effet d'uniformiser presque instantanément tout différentiel de pression qui apparaîtrait au travers du front d'évaporation. Il est courant de considérer l'écoulement comme quasi-isobare en physique des flammes. Nous verrons plus loin où et comment l'hypothèse « quasi-isobare » est utilisée.

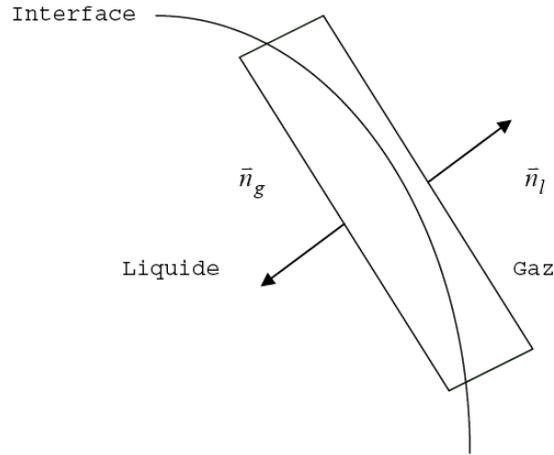


Figure III.10 Représentation schématique du volume de contrôle autour de l'interface I

On considère un volume de contrôle incluant une interface séparant deux phases $k= l, g$ possédant chacune N constituants (figure III.10).

Pour alléger la notation, on supprime le symbole « \wedge » mais on se souviendra que les vitesses sont exprimées dans le repère de l'interface I.

On intègre les équations de conservation dans ce volume de contrôle en se plaçant en régime permanent :

$$\int_V \vec{\nabla} \cdot (\rho Y_i \vec{u} - \rho D \vec{\nabla} Y_i) dV = 0$$

$$\int_V \vec{\nabla} \cdot (\rho H \vec{u} + \vec{q}) dV = 0$$

Soit

$$\int_S (\rho Y_i \vec{u} - \rho D \vec{\nabla} Y_i) \cdot \vec{n} dS = 0$$

$$\int_S (\rho H \vec{u} + \vec{q}) \cdot \vec{n} dS = 0$$

La surface S est composée d'une surface traversant la phase liquide et d'une autre surface traversant le gaz :

$$\int_{S_l} (\rho_l Y_{li} \vec{u}_l - \rho_l D_l \vec{\nabla} Y_{li}) \cdot \vec{n}_l dS + \int_{S_g} (\rho_g Y_{gi} \vec{u}_g - \rho_g D_g \vec{\nabla} Y_{gi}) \cdot \vec{n}_g dS = 0$$

$$\int_{S_l} (\rho_l H_l \vec{u}_l + \vec{q}_l) \cdot \vec{n}_l dS + \int_{S_g} (\rho_g H_g \vec{u}_g + \vec{q}_g) \cdot \vec{n}_g dS = 0$$

En faisant tendre les surfaces latérales vers zéro le volume de contrôle vient alors épouser précisément l'interface. Les surfaces longitudinales côté liquide et côté gaz deviennent égales. On peut alors écrire :

$$(\rho_{l,I} Y_{li,I} \vec{u}_{l,I} - \rho_{l,I} D_{l,I} \vec{\nabla} Y_{li,I}) \cdot \vec{n}_l + (\rho_{g,I} Y_{gi,I} \vec{u}_{g,I} - \rho_{g,I} D_{g,I} \vec{\nabla} Y_{gi,I}) \cdot \vec{n}_g = 0 \quad \forall i$$

$$(\rho_{l,I} H_{l,I} \vec{u}_{l,I} + \vec{q}_{l,I}) \cdot \vec{n}_l + (\rho_{g,I} H_{g,I} \vec{u}_{g,I} + \vec{q}_{g,I}) \cdot \vec{n}_g = 0$$

Toutes les grandeurs qui interviennent dans ces équations sont des grandeurs d'interface et sont indicées par « I ». En utilisant maintenant l'hypothèse quasi-isobare, à savoir $H_{k,I} = h_{k,I}$ où $h_{k,I}$ désigne l'enthalpie spécifique au sein de la phase k, on obtient l'équation d'énergie que nous utiliserons par la suite :

$$(\rho_{l,I} h_{l,I} \bar{u}_{l,I} + \bar{q}_{l,I}) \cdot \bar{n}_l + (\rho_{g,I} h_{g,I} \bar{u}_{g,I} + \bar{q}_{g,I}) \cdot \bar{n}_g = 0$$

III.3.3.1 Conditions d'interface pour le bilan de masse

On somme les équations de conservation de la masse de chaque espèce i :

$$(\rho_{l,I} \bar{u}_{l,I} \sum_i Y_{li,I} - \rho_{l,I} D_{l,I} \sum_i \bar{\nabla} Y_{li,I}) \cdot \bar{n}_l + (\rho_{g,I} \bar{u}_{g,I} \sum_i Y_{gi,I} - \rho_{g,I} D_{g,I} \sum_i \bar{\nabla} Y_{gi,I}) \cdot \bar{n}_g = 0$$

ce qui se simplifie en :

$$\rho_{l,I} \bar{u}_{l,I} \cdot \bar{n}_l + \rho_{g,I} \bar{u}_{g,I} \cdot \bar{n}_g = 0$$

ou encore :

$$\dot{m}_l + \dot{m}_g = 0$$

avec le débit masse de la phase k par unité de surface et de temps :

$$\dot{m}_k = \rho_{k,I} \bar{u}_{k,I} \cdot \bar{n}_k$$

Avec ces notations, la condition d'interface en masse pour chaque espèce i s'écrit :

$$\dot{m}_l Y_{li,I} - \rho_{l,I} D_{l,I} \bar{\nabla} Y_{li,I} \cdot \bar{n}_l + \dot{m}_g Y_{gi,I} - \rho_{g,I} D_{g,I} \bar{\nabla} Y_{gi,I} \cdot \bar{n}_g = 0$$

La loi de Fick nous permet de noter les flux de masse diffusés par :

$$\bar{J}_{ki,I} = -\rho_{k,I} D_{k,I} \bar{\nabla} Y_{ki,I}$$

La condition d'interface pour chaque espèce i devient alors :

$$\dot{m}_l Y_{li,I} + \bar{J}_{li,I} \cdot \bar{n}_l + \dot{m}_g Y_{gi,I} + \bar{J}_{gi,I} \cdot \bar{n}_g = 0$$

On a aussi $\sum_i \bar{J}_{k,i} = 0$ comme conséquence de la relation $\sum_i Y_{k,i} = 1$, au sein de chaque phase k.

La loi de Fick fait intervenir le gradient de concentration, qui est un paramètre calculable uniquement par voie analytique dans un nombre de situations très limitées, ou par voie numérique. Dans l'approche choisie d'un modèle intégro - différentiel, la détermination des gradients locaux et plus directement des flux diffusés va être réalisée par l'introduction de coefficients d'échange macroscopiques, dont la détermination est réalisée au moyen d'expériences. L'introduction des coefficients d'échange massique permet d'exprimer les flux de diffusion massique en utilisant la définition d'un gradient macroscopique,

$$\bar{\nabla} Y_{ki,I} = \frac{Y_{ki,\infty} - Y_{ki,I}}{l} \bar{n}_k$$

où l est la distance séparant les endroits où les fractions massiques de l'espèce i atteignent les valeurs $Y_{ki,00}$ (à l'infini) et $Y_{ki,I}$ (à l'interface) au sein de la phase k.

Dans ce cadre, les flux de diffusion massique s'écrivent :

$$\bar{J}_{ki,I} = -\rho_{k,I} D_{k,I} \bar{\nabla} Y_{ki,I} = \rho_{k,I} \frac{D_{k,I}}{l} (Y_{ki,I} - Y_{ki,\infty}) \bar{n}_k$$

L'épaisseur de diffusion massique l n'étant pas aisément accessible, on utilise plutôt des coefficients d'échange massique macroscopiques basés sur des corrélations que l'on développera ci-après. Ainsi, les flux de diffusion massique deviennent :

$$\bar{J}_{ki,I} = \rho_{k,I} H_{Mk} (Y_{ki,I} - Y_{ki,\infty}) \bar{n}_k$$

où H_{Mk} représente le coefficient d'échange massique macroscopique dans la phase k .

La présence de l'indice k dans les relations précédente indique qu'il faudra disposer des coefficients d'échange de chaque côté de l'interface, autant du côté gaz que du côté liquide. Notre démarche s'éloigne sur ce point des approches traditionnelles où seul le coefficient d'échange côté gaz est utilisé. Dans la suite de ce paragraphe, on considère une des deux phases en omettant la distinction par l'indice k .

Le coefficient d'échange massique H_M dans une des deux phases bordant l'interface est obtenu à partir d'une corrélation portant sur le nombre de Sherwood :

$$Sh = \frac{H_M \cdot \delta}{D}$$

où δ est une longueur caractéristique du problème, comme le diamètre des gouttes par exemple, ou l'épaisseur de liquide à considérer. Les corrélations portant sur le nombre de Sherwood sont déduites de celles portant sur le nombre de Nusselt Nu qui se présentent sous la forme :

$$Nu = a + b \cdot Pr^c \cdot Re^d$$

avec a , b , c , d des paramètres issus de solutions exactes et d'expériences ($a = 2$, $b = 0,6$, $c = 1/3$ et $d = 1/2$) et :

- $Pr = \frac{\mu C_p}{\lambda}$ avec μ la viscosité dynamique, C_p la capacité calorifique à pression constante et λ la conductivité thermique. Toutes ces grandeurs sont caractéristiques du fluide.
- $Re = \frac{\rho d \Delta u}{\mu}$ où Δu représente l'écart de vitesses entre phases, déterminé par le modèle macroscopique.

A partir de cette corrélation, on en déduit celle portant sur le nombre de Sherwood :

$$Sh = a + b \cdot Sc^c \cdot Re^d$$

où Sc désigne le nombre de Schmidt

$$Sc = \frac{\mu}{\rho D}$$

En résumé, le système à considérer est :

$$\dot{m}_l Y_{li,I} + \bar{J}_{li,I} \bar{n}_l + \dot{m}_g Y_{gi,I} + \bar{J}_{gi,I} \bar{n}_g = 0$$

$$\bar{J}_{ki,I} = \rho_{k,I} H_{Mk} (Y_{ki,I} - Y_{ki,\infty}) \bar{n}_k$$

$$Sh_k = \frac{H_{Mk} d}{D_{k,I}}$$

$$Sh_k = a_k + b_k Sc_k^{c_k} Re_k^{d_k}$$

$$\dot{m}_l + \dot{m}_g = 0$$

Avec la contrainte :

La forme pratique de la condition d'interface en masse pour chaque espèce i, qui va être utilisée par la suite, se présente sous la forme (en n'oubliant pas l'indice I relatif aux grandeurs à l'interface) :

$$\dot{m}_l Y_{li,I} + \rho_{l,I} H_{Ml} (Y_{li,I} - Y_{li,\infty}) + \dot{m}_g Y_{gi,I} + \rho_{g,I} H_{Mg} (Y_{gi,I} - Y_{gi,\infty}) = 0$$

On rappelle que dans ce système les inconnues sont $Y_{li,I}$, $Y_{gi,I}$, $\rho_{l,I}$, $\rho_{g,I}$, \dot{m}_l , et \dot{m}_g . Les fonctions H_{Mk} et $Y_{ki,\infty}$ sont connues par hypothèse ou par construction de corrélations adaptées, caractéristiques de l'écoulement.

III.3.3.2 Conditions d'interface pour le bilan d'énergie

La condition d'interface en énergie s'écrit :

$$(\rho_{l,I} h_{l,I} \bar{u}_{l,I} + \bar{q}_{l,I}) \bar{n}_l + (\rho_{g,I} h_{g,I} \bar{u}_{g,I} + \bar{q}_{g,I}) \bar{n}_g = 0$$

avec le flux de chaleur donné par la relation suivante :

$$\bar{q}_{k,I} = -\lambda_{k,I} \bar{\nabla} T_{k,I} - \rho_{k,I} D_{k,I} \sum_i h_{ki,I} \bar{\nabla} Y_{ki,I} = -\lambda_{k,I} \bar{\nabla} T_{k,I} + \sum_i h_{ki,I} \bar{J}_{ki,I}$$

et l'enthalpie spécifique de mélange définie par :

$$h_{k,I} = \sum_i Y_{ki,I} h_{ki,I}$$

La condition d'interface en énergie, compte tenu de la définition du débit masse s'écrit :

$$\dot{m}_l h_{l,I} + \bar{q}_{l,I} \bar{n}_l + \dot{m}_g h_{g,I} + \bar{q}_{g,I} \bar{n}_g = 0$$

Compte tenu des définitions précédentes elle devient :

$$\dot{m}'_l \sum_i Y_{li,I} h_{li,I} + \sum_i h_{li,I} \bar{J}_{li,I} \bar{n}_l - \lambda_{l,I} \bar{\nabla} T_{l,I} \bar{n}_l + \dot{m}'_g \sum_i Y_{gi,I} h_{gi,I} + \sum_i h_{gi,I} \bar{J}_{gi,I} \bar{n}_g - \lambda_{g,I} \bar{\nabla} T_{g,I} \bar{n}_g = 0$$

Cette relation peut se simplifier en factorisant les enthalpies des différents constituants :

$$\sum_i h_{li,I} (\dot{m}_l Y_{li,I} + \bar{J}_{li,I} \bar{n}_l) - \lambda_{l,I} \bar{\nabla} T_{l,I} \bar{n}_l + \sum_i h_{gi,I} (\dot{m}_g Y_{gi,I} + \bar{J}_{gi,I} \bar{n}_g) - \lambda_{g,I} \bar{\nabla} T_{g,I} \bar{n}_g = 0$$

La condition d'interface en masse pour l'espèce i nous informe que :

$$\dot{m}_l Y_{li,I} + \bar{J}_{li,I} \cdot \bar{n}_l + \dot{m}_g Y_{gi,I} + \bar{J}_{gi,I} \cdot \bar{n}_g = 0$$

Alors la condition d'interface en énergie devient :

$$\sum_i (h_{li,I} - h_{gi,I})(\dot{m}_l Y_{li,I} + \bar{J}_{li,I} \cdot \bar{n}_l) - \lambda_l \bar{\nabla} T_l \cdot \bar{n}_l - \lambda_g \bar{\nabla} T_g \cdot \bar{n}_g = 0$$

Comme dans le cas des flux de diffusion massique, introduisons maintenant les coefficients d'échanges thermiques macroscopiques concernant les flux de chaleur conductifs en utilisant la définition d'un gradient macroscopique :

$$\bar{\nabla} T_{k,I} = \frac{T_{k,\infty} - T_{k,I}}{l} \bar{n}_k$$

où l est la distance séparant les endroits où les températures atteignent les valeurs $T_{k,\infty}$ (à l'infini) et $T_{k,I}$ (à l'interface) au sein de la phase k . Comme dans le cas des flux de diffusion massique, des coefficients d'échange thermiques macroscopiques résultant de corrélations vont être utilisés.

Dans ce cadre, les flux de chaleur conductifs s'écrivent :

$$\bar{q}_{ck,I} \cdot \bar{n}_k = -\lambda_{k,I} \bar{\nabla} T_{k,I} \cdot \bar{n}_k = \frac{\lambda_{k,I}}{l} (T_{k,I} - T_{k,\infty}) = H_{Tk} (T_I - T_{k,\infty})$$

où H_{Tk} représente le coefficient d'échange convectif macroscopique dans la phase k . Dans cette dernière relation, T_I représente la température à l'interface qui est commune aux deux phases et $T_{k,\infty}$ représente la température de la phase k à l'infini et donnée par la résolution de l'écoulement moyen ou établie par hypothèse.

Le coefficient d'échange convectif est basé sur une corrélation portant sur le nombre de Nusselt, comme précisé auparavant, dont les paramètres sont issus d'expériences, et dont les données proviennent également des paramètres de l'écoulement.

Compte tenu de ces définitions, la condition d'interface en énergie devient :

$$\sum_i (h_{li,I} - h_{gi,I})(\dot{m}_l Y_{li,I} + \rho_{l,I} H_{Ml} (Y_{li,I} - Y_{li,\infty})) + H_{Tl} (T_I - T_{l,\infty}) + H_{Tg} (T_I - T_{g,\infty}) = 0$$

III.3.3.3 Application : cas où le liquide est de l'eau pure, le gaz contient plusieurs espèces i

Considérons le cas où le gaz est constitué de plusieurs espèces, mais une seule espèce (l'eau) est présente dans la phase liquide. Ainsi les équations précédentes se réduisent à :

Bilan de masse :

$$\begin{aligned} \dot{m}_l + \dot{m}_g Y_{g,eau,I} + \rho_{g,I} H_{Mg} (Y_{g,eau,I} - Y_{g,eau,\infty}) &= 0 \\ \dot{m}_g Y_{g,i,I} + \rho_{g,I} H_{Mg} (Y_{g,i,I} - Y_{g,i,\infty}) &= 0 \quad \forall i \neq eau \end{aligned}$$

En utilisant cette dernière relation dans l'équation précédente, le système se réécrit :

$$\dot{m}_g = \frac{\rho_{g,I} H_{Mg} (Y_{g,eau,I} - Y_{g,eau,\infty})}{(1 - Y_{g,eau,I})}$$

$$Y_{g,i,I} = \frac{\rho_{g,I} H_{Mg} Y_{g,i,\infty}}{(\dot{m}_g + \rho_{g,I} H_{Mg})} \quad \forall i \neq eau$$

Bilan d'énergie :

$$(h_{l,eau,I} - h_{g,eau,I}) \dot{m}_l + H_{Tl} (T_I - T_{l,\infty}) + H_{Tg} (T_I - T_{g,\infty}) = 0$$

Ceci constitue un résultat particulièrement simple. Cette relation permet d'exprimer le débit masse :

$$\dot{m}_l = \frac{H_{Tl} (T_I - T_{l,\infty}) + H_{Tg} (T_I - T_{g,\infty})}{h_{g,eau,I} - h_{l,eau,I}}$$

Le liquide et sa vapeur étant en équilibre thermodynamique à l'interface (égalité des pressions, températures et potentiels chimiques), la différence d'enthalpie correspond donc à la chaleur latente de vaporisation,

$$h_{g,eau,I} - h_{l,eau,I} = L_{v,eau} (T_I)$$

En remplaçant le débit de liquide par celui du gaz on obtient :

$$\dot{m}_g = \frac{H_{Tl} (T_{l,\infty} - T_I) + H_{Tg} (T_{g,\infty} - T_I)}{L_{v,eau} (T_I)}$$

Rq : Si, de plus, les effets liés aux gradients de concentration sont absents, cette relation permet de déterminer directement le débit masse. Ce type de situation correspond par exemple au cas d'une goutte de liquide disposée dans sa seule vapeur. Dans ce cas l'égalité des débits massiques des deux côtés de l'interface est automatiquement satisfaite.

Les gradients de concentration étant présents, il faut satisfaire la condition d'interface en masse pour chaque constituant, en même temps que la condition d'interface en énergie.

Notons aussi que la condition d'interface en énergie nécessite la connaissance de H_{Tl} et de la température d'interface T_I

III.3.4 Détermination des coefficients d'échanges entre phases et relations thermodynamiques

Afin de pouvoir construire des modèles complets d'évaporation, avec les hypothèses listées au chapitre III.1.1, il nous reste à écrire de manière explicite les relations thermodynamiques de fermeture au niveau de l'interface I et à déterminer une expression des coefficients d'échange thermiques côtés gaz et côté liquide.

III.3.4.1 Relations thermodynamiques à l'interface I

Il nous faut ici déterminer les concentrations $Y_{g,i,I}$ ainsi que la densité de mélange du gaz $\rho_{g,I}$ au niveau de I. Il peut s'agir de relations liant ces deux variables avec la température d'interface T_I . Plus exactement, on va construire des relations du type :

$$Y_{k,i,I} = Y_{k,i,I}(T_I)$$

en se plaçant du côté gaz $k = g$.

On s'oriente vers cette dernière possibilité, qui est dictée par la thermodynamique d'équilibre. En effet, les conditions d'équilibre thermodynamique appliquées à l'interface s'écrivent :

$$T_{1,I} = T_{2,I} = T_I, \text{ imposée par la solution de l'équation de la chaleur}$$

$$P_{1,I} = P_{2,I} = P, \text{ imposée par le caractère isobare du front d'évaporation}$$

$$\mu_{1,I} = \mu_{2,I}, \text{ égalité des potentiels chimiques lié à l'hypothèse d'équilibre thermodynamique}$$

Pour une espèce i , présente sous forme liquide et gazeuse, ces trois conditions ont pour conséquence que la pression partielle de la vapeur du liquide à la surface de la goutte est égale à la pression de saturation prise à la température T_I .

$$P_{g,i,I} = P_{sat}(T_I)$$

Pour un gaz parfait, la loi de Dalton pour l'espèce i s'écrit :

$$P_{g,i,I} V = n_{g,i,I} \hat{R} T_I$$

Avec V un volume arbitraire contenant $n_{g,i,I}$ moles de l'espèce i . L'équation d'état du mélange nous donne :

$$PV = \sum_i n_{g,i,I} \hat{R} T_I$$

La fraction molaire est définie par : $x_{i,I} = \frac{n_{g,i,I}}{\sum_i n_{g,i,I}}$

Nos équations font intervenir des fractions massiques Y . Il faut donc utiliser des expressions de transformation entre ces deux variables. La fraction massique s'écrit :

$$Y_i = \frac{n_i \hat{M}_i}{\sum_j n_j \hat{M}_j}$$

Où \hat{M}_i est la masse molaire de l'espèce i . Par ailleurs, la masse molaire de mélange est définie par la relation :

$$\hat{M} = \frac{\sum_i n_i \hat{M}_i}{\sum_i n_i} = \sum_i x_i \hat{M}_i$$

On en déduit que $\hat{M} \sum_i n_i = \sum_i n_i \hat{M}_i$. On remplace alors le dénominateur dans la définition de la fraction massique et on obtient :

$$Y_i = x_i \frac{\hat{M}_i}{\hat{M}}$$

III.3.4.2 Détermination des coefficients d'échanges H à l'interface I.

Dans cette section, on détermine compte tenu des hypothèses formulées et des inconnues de notre problème les coefficients d'échanges de chaleur nécessaire à la modélisation de l'évaporation d'une goutte de liquide.

a. Détermination du coefficient d'échange convectif pour le gaz

La détermination du coefficient d'échange convectif pour la phase gazeuse repose sur les corrélations exprimant le nombre de Nusselt sous la forme :

$$Nu = a + b Pr^c Re^d$$

Dans le cas d'un échange de chaleur entre un milieu extérieur et une sphère, nous avons retenu une expression de Nu sous la forme :

$$Nu = 2 + 0,6 Pr^{\frac{1}{3}} Re^{\frac{1}{2}}$$

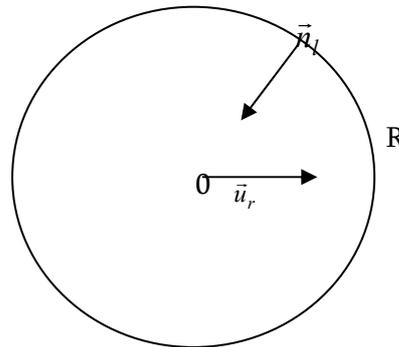
Il s'exprime également de la façon suivante dans le cas d'une sphère de rayon R et de diamètre d :

$$Nu = \frac{H_{Tg} 4\pi R^2}{\lambda_g 2\pi R} = \frac{H_{Tg} d}{\lambda_g}$$

D'où l'on déduit H_{Tg} qui peut donc s'écrire sous la forme : $H_{Tg} = \frac{\lambda_g Nu}{d}$

b. Détermination du coefficient d'échange convectif pour le liquide

On considère une goutte sphérique de liquide :



Le vecteur unitaire radial est représenté par \vec{u}_r .

Comme nous l'avons décrit dans l'analyse bibliographique, en raison des mouvements de convection internes à la particule il n'est pas possible de proposer un profil de température interne qui vérifie une quelconque équation aux dérivées partielles. On suppose alors que le profil de température dépend uniquement du rayon, c'est à dire que le profil est à symétrie centrale. Les conditions aux limites à respecter sont :

$$\left. \frac{\partial T}{\partial r} \right)_{r=0} = 0 \quad (\text{Condition de symétrie})$$

$$T_{r=R} = T_i \quad (\text{Température d'interface})$$

Par ailleurs, le modèle d'écoulement diphasique macroscopique permet d'accéder à l'énergie interne moyenne de la goutte et par voie de conséquence à sa température moyenne \bar{T}_i puisque

$$\text{par définition : } \bar{T}_i = \frac{1}{V} \int_V T(r) dV$$

Nous disposons alors de trois conditions que nous pouvons utiliser pour déterminer la forme algébrique du champ de température. Ce profil peut faire intervenir trois paramètres. Le profil le plus simple ne faisant intervenir que trois paramètres est une forme parabolique : $T(r) = ar^2 + br + c$ dont les constantes a, b et c sont à déterminer. On va ainsi, dans un premier temps, développer cette solution et déterminer le coefficient d'échange thermique correspondant. Dans un deuxième temps, on proposera une résolution de l'équation de la chaleur du côté liquide à l'aide d'un modèle réduit quasi-analytique.

A partir d'une forme supposée parabolique du profil de température on obtient l'expression de sa dérivée :

$$\frac{\partial T}{\partial r} = 2ar + b.$$

$$\text{La condition de symétrie } \left. \frac{\partial T}{\partial r} \right)_{r=0} = 0 \text{ impose } b = 0.$$

La température d'interface donne une relation entre les deux autres constantes : $T_i = aR^2 + c$.

L'intégration du profil de température sur la goutte donne une autre relation :

$$\bar{T}_l = \frac{3}{R^3} \int_0^R T(r)r^2 dr \text{ qui devient : } \bar{T}_l = \frac{3aR^2}{5} + c$$

L'élimination de la constante c fournit la relation : $T_l - \bar{T}_l = \frac{2aR^2}{5}$.

On en déduit alors la dérivée de la température en tout point : $\frac{\partial T}{\partial r} = \frac{5(T_l - \bar{T}_l)}{R^2} r$

Le flux de chaleur à l'interface s'écrit : $\bar{q}_{l,l} = -\lambda_l \left. \frac{\partial T_l}{\partial r} \right)_{r=R} \bar{u}_r$.

Et le coefficient d'échange de chaleur est défini par : $\bar{q}_{l,l} \cdot \bar{n}_l = H_{\pi} (T_l - T_{l,\infty})$

Comme $\bar{n}_l = -\bar{u}_r$, on obtient : $\lambda_l \frac{5(T_l - \bar{T}_l)}{R} = H_{\pi} (T_l - T_{l,\infty})$

On suppose alors : $\bar{T}_l = T_{l,\infty}$.

Ceci est couramment admis lorsqu'on réalise un couplage où un modèle macroscopique fournit les conditions à l'infini d'un modèle microscopique, ces conditions étant obtenues comme valeurs moyennes de l'écoulement dans la phase macroscopique.

On obtient alors :

$$H_{\pi} = \frac{5\lambda_l}{R}$$

Ce résultat correspond au coefficient d'échange que nous recherchions. Cette solution garantit la conservation de l'énergie sur la globalité de la goutte, ainsi que les deux conditions aux limites essentielles. Elle correspond par ailleurs à un nombre de Nusselt interne de 10.

On se propose maintenant d'aborder le cas d'une forme plus générale du profil de température au sein de la phase liquide, en fonction de l'avancement du processus d'évaporation. A nouveau on va chercher à relier la température de surface aux coefficients d'échanges thermiques H_{π} .

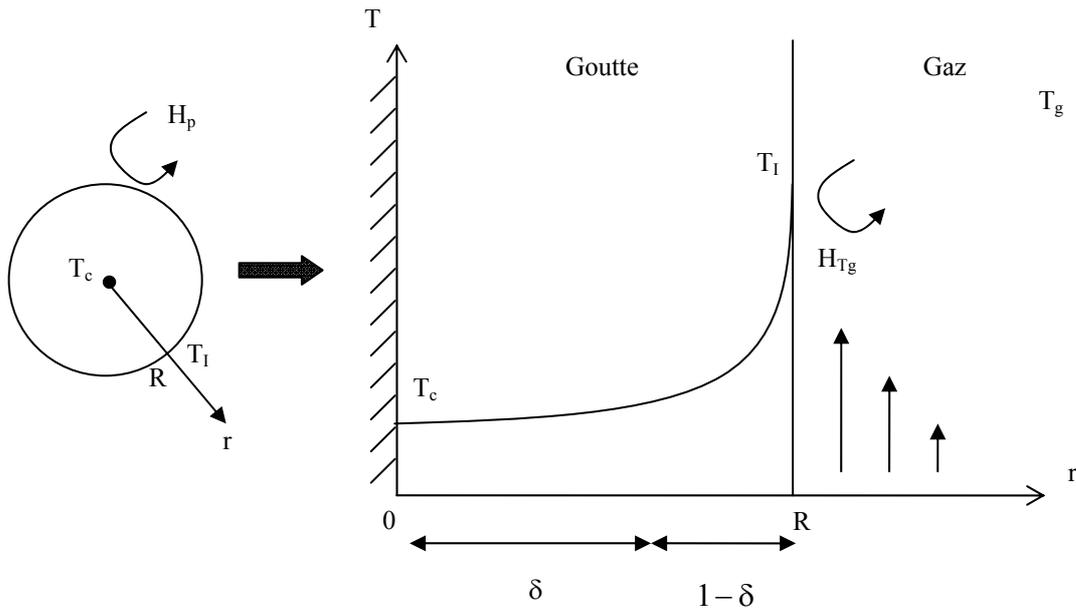
Le problème de chauffage d'une goutte sphérique de rayon R et de température initiale T_c (comme température de cœur) par un gaz chaud de température T_g peut être représentée selon le schéma ci-dessous.

Compte tenu de la symétrie sphérique supposée de la goutte et pour faciliter l'analyse du problème, on définit les variables adimensionnées suivantes :

$$\eta = \frac{r}{R} \quad \text{et} \quad \tau = \frac{t}{R^2/D}$$

Avec $D = \frac{\lambda}{\rho C_p}$ la diffusivité thermique du liquide, et R le rayon de la goutte.

Le groupement R^2/D représente le temps caractéristique de diffusion thermique.



Lorsque l'évaporation n'est pas établie ($T_i < T(\text{sat})$), le flux de chaleur transmis à la goutte par échange convectif s'écrit :

$$q_{cv} = -H_{Tg}(T_g - T_i)$$

On définit alors le nombre de Biot par la relation :

$$B_i = \frac{H_{Tg} R}{\lambda}$$

Ce nombre est représentatif du profil de température au sein de la goutte. Lorsque ce nombre tend vers zéro, la goutte peut être considérée comme très conductrice et sa température s'homogénéise très rapidement. Inversement, lorsque ce nombre est très grand, une couche limite thermique est d'abord amenée à se développer. Selon le temps de chauffage, on peut définir deux régimes, que l'on qualifiera ici de régime aux temps courts et de régime aux temps longs.

Lorsque l'on observe le profil de température immédiatement après le début du réchauffement de la goutte, une couche limite thermique apparaît (profil aux temps courts) et la température au cœur de la goutte T_c n'est pas encore affectée par l'écoulement gazeux. Pour cette analyse aux temps courts, on considère un profil de température de la forme :

$$\begin{cases} T = T_c + (T_i - T_c) \left(\frac{\eta - \delta}{1 - \delta} \right)^n & \text{si } 1 \geq \eta \geq \delta \geq 0 \\ T = T_c & \text{sinon} \end{cases}$$

Où δ représente la distance entre le centre de la goutte et la fin de la couche limite thermique. L'épaisseur de la couche limite est ainsi donnée par $(1 - \delta)$. Si $n = 1$, le profil est linéaire au sein de la couche limite. Si $n = 2$, ce profil est parabolique. T_c est constante pendant cette phase.

On suppose connue la température moyenne de la phase liquide (donnée par le modèle d'écoulement). On peut donc écrire une première relation sur δ et les différentes températures du problème. Avec les coordonnées adimensionnées cette relation s'écrit :

$$\bar{T}_{liq} = 3 \int_0^1 T \eta^2 d\eta$$

Soit, en fonction de δ :

$$\begin{aligned} \bar{T}_{liq} &= 3 \int_0^{\delta} T \eta^2 d\eta + 3 \int_{\delta}^1 T \eta^2 d\eta \\ \bar{T}_{liq} &= 3 \int_0^{\delta} T_c \eta^2 d\eta + 3 \int_{\delta}^1 \left[T_c + (T_I - T_c) \left(\frac{\eta - \delta}{1 - \delta} \right)^n \right] \eta^2 d\eta \end{aligned}$$

Qui devient, après développement (dans le cas $n=1$, pour simplifier l'écriture) :

$$\bar{T}_{liq} = T_c + 3(T_I - T_c) \left[\frac{1}{4} (1 + \delta)(1 + \delta^2) - \frac{1}{3} \delta(1 + \delta + \delta^2) \right]$$

De plus, le flux dans la goutte au niveau de l'interface s'écrit :

$$q_{liq}(r = R) = -\lambda \left. \frac{\partial T}{\partial r} \right|_{r=R}$$

Ou bien encore,

$$q_{liq}(r = R) = q_{liq}(\eta = 1) = -\lambda \left. \frac{\partial T}{\partial \eta} \right|_{\eta=1} \frac{d\eta}{dr}$$

Avec le profil choisi,

$$\frac{\partial T}{\partial \eta} = \frac{n(T_I - T_c)}{1 - \delta} \left(\frac{\eta - \delta}{1 - \delta} \right)^{n-1}$$

Et on obtient l'expression du flux à l'interface :

$$q_{liq}(\eta = 1) = -\frac{\lambda}{R} \frac{n(T_I - T_c)}{1 - \delta}$$

Comme $q_{liq}(\eta = 1) = -H_{Tl}(T_I - \bar{T}_{liq})$, on obtient directement une expression du coefficient d'échange thermique côté liquide :

$$H_{Tl} = \frac{\lambda}{R} \frac{n(T_I - T_c)}{(1 - \delta)(T_I - \bar{T}_{liq})}$$

Peu après, la couche limite s'est développée et a atteint le cœur de la goutte (profil aux temps longs), modifiant ainsi la valeur de T_c . Si l'épaisseur de la couche limite calculée est supérieure à 1, alors le profil de température doit être modifié. On prend alors :

$$T = T_c + (T_l - T_c)\eta^n$$

Le flux à l'interface côté liquide peut être écrit sous la forme :

$$q_{liq}(r = R) = q_{liq}(\eta = 1) = -\lambda \left. \frac{\partial T}{\partial \eta} \right|_{\eta=1} \frac{d\eta}{dr}$$

$$\frac{\partial T}{\partial \eta} = n(T_l - T_c)\eta^{n-1}$$

Ce qui nous conduit à une expression du coefficient d'échange thermique H_{Tl}

$$H_{Tl} = \frac{\lambda n(T_l - T_c)}{R(T_l - \bar{T}_{liq})}$$

De la même façon que précédemment, on calcule la valeur de la température moyenne du liquide pour trouver une relation reliant les températures caractéristiques du problème posé :

$$\bar{T}_{liq} = 3 \int_0^1 T \eta^2 d\eta$$

$$\bar{T}_{liq} = 3 \int_0^1 [T_c + (T_l - T_c)\eta^n] \eta^2 d\eta$$

Soit après développement,

$$\bar{T}_{liq} = T_c + 3 \frac{T_l - T_c}{n + 3}$$

Ou bien encore

$$\bar{T}_{liq} = \frac{3T_l + nT_c}{n + 3}$$

La notion de temps court est associée à la valeur du nombre de Biot. Comme nous le verrons dans le chapitre suivant, la détermination de la température d'interface T_l nécessite un algorithme de résolution adaptée. Si on prend en compte l'effet de couche limite telle que nous venons de le présenter, la méthode de résolution doit permettre de déterminer de manière itérative δ et T_c . La frontière temps courts / temps longs est fixée par la valeur de δ .

III.3.5 Récapitulatif dans le cas particulier d'une goutte d'eau pure dans un gaz composé de plusieurs espèces i

A titre d'exemple et pour finir le chapitre III.3, on récapitule ici les équations de saut à l'interface pour ce cas particulier ainsi que les relations de fermeture nécessaires. Comme nous l'avons vu à la section III.3.3.3, le système à résoudre correspond aux équations de bilan de masse à l'interface couplées à la condition d'interface en énergie :

$$\begin{aligned}\dot{m}_g &= \frac{\rho_{g,I} H_{Mg} (Y_{g,eau,I} - Y_{g,eau,\infty})}{(1 - Y_{g,eau,I})} \\ \dot{m}_g &= \frac{H_{Tl}(T_{l,\infty} - T_I) + H_{Tg}(T_{g,\infty} - T_I)}{L_{v,eau}(T_I)} \\ Y_{g,i,I} &= \frac{\rho_{g,I} H_{Mg} Y_{g,i,\infty}}{(\dot{m}_g + \rho_{g,I} H_{Mg})} \quad \forall i \neq eau\end{aligned}$$

Les inconnues du système sont :

$$\dot{m}_g, \rho_{g,I}, T_I \text{ et } Y_{g,i,I} \quad \forall i$$

Les autres fonctions sont obtenues directement à partir du modèle diphasique macroscopique, ou de corrélations. Les coefficients H_M et H_T sont des paramètres dans ce système.

Toutes ces grandeurs sont déterminées par la résolution d'un système d'équations aux dérivées partielles, dont le présent modèle de transfert de masse constitue un sous modèle.

Les relations de fermetures deviennent pour cette application :

$$\begin{aligned}Y_{g,eau,I}(T_I) &= \frac{\hat{M}_{eau}}{\hat{M}_{eau} - \hat{M}'_{\infty} + \frac{P}{P_{sat,eau}(T_I)} \hat{M}'_{\infty}} \\ \rho_{g,I}(T_I) &= \frac{(\hat{M}_{eau} - \hat{M}'_{\infty}) P_{sat,eau}(T_I) + P \hat{M}'_{\infty}}{\hat{R} T_I}\end{aligned}$$

En effet, les conditions d'équilibre à l'interface donnent dans le cas précis :

$$P_{g,eau,I} = P_{sat,eau}(T_I)$$

Et la loi de Dalton pour un gaz parfait s'écrit :

$$P_{g,eau,I} V = n_{g,eau,I} \hat{R} T_I$$

Où $n_{g,eau,I}$ est le nombre de moles de molécules d'eau comprises dans un volume V arbitraire. Par définition de la fraction molaire, de la masse molaire de mélange et de la fraction massique, on a également :

$$x_{g,eau,I} = \frac{P_{g,eau,I}}{P} = \frac{P_{sat,eau}(T_I)}{P}$$

et

$$Y_{g,eau,I} = \frac{x_{g,eau,I} \hat{M}_{eau}}{\hat{M}_I}$$

Il reste à déterminer la masse molaire de mélange de gaz à l'interface :

$$\hat{M}_I = \sum_i x_{g,i,I} \hat{M}_i = x_{g,eau,I} \hat{M}_{eau} + \sum_{i \neq eau} x_{g,i,I} \hat{M}_i$$

Or

$$, \forall i \neq eau, x_i = \frac{n_i}{\sum_j n_j} = \frac{n_i}{\sum_{j \neq eau} n_j} \times \frac{\sum_{j \neq eau} n_j}{\sum_j n_j} = \frac{n_i}{\sum_{j \neq eau} n_j} \times \frac{\sum_j n_j - n_{eau}}{\sum_j n_j} = x'_i (1 - x_{eau})$$

Avec x'_i la fraction molaire de l'espèce i par rapport au mélange constitué uniquement des espèces non évaporantes. La masse molaire de mélange à l'interface devient :

$$\hat{M}_I = x_{g,eau,I} \hat{M}_{eau} + (1 - x_{g,eau,I}) \sum_{i \neq eau} x'_{g,i,I} \hat{M}_i = x_{g,eau,I} \hat{M}_{eau} + (1 - x_{g,eau,I}) \hat{M}'_I$$

Où $\hat{M}'_I = \sum_{i \neq eau} x'_{g,i,I} \hat{M}_i$ est la masse molaire de mélange constitué des seules espèces non évaporantes. Nous allons montrer ci-après que cette quantité est en fait une donnée du problème. Pour cela on va exprimer \hat{M}'_I en termes de fractions massiques. De la même façon, on définit la fraction massique d'une espèce i par rapport au mélange non évaporant :

$$Y'_i = \frac{n_i \hat{M}_i}{\sum_{j \neq eau} n_j \hat{M}_j} \quad \forall i \neq eau$$

Qui compte tenu des définitions précédentes peut s'écrire :

$$Y'_i = \frac{n_i \hat{M}_i}{\sum_{j \neq eau} n_j \hat{M}'_j} = x'_i \frac{\hat{M}_i}{\hat{M}'_I}$$

En effectuant la somme sur toutes les espèces non évaporantes, nous obtenons :

$$\sum_{i \neq \text{eau}} \frac{Y'_i}{\hat{M}_i} = \frac{\sum_{i \neq \text{eau}} x'_i}{\hat{M}'} = \frac{1}{\hat{M}'}$$

Puis, comme pour les fractions molaires, nous avons pour toute espèce i différente de l'eau,

$$Y_i = \frac{n_i \hat{M}_i}{\sum_j n_j \hat{M}_j} = \frac{n_i \hat{M}_i}{\sum_{j \neq \text{eau}} n_j \hat{M}_j} \times \frac{\sum_{j \neq \text{eau}} n_j \hat{M}_j}{\sum_j n_j \hat{M}_j} = \frac{n_i \hat{M}_i}{\sum_{j \neq \text{eau}} n_j \hat{M}_j} \times \frac{\sum_j n_j \hat{M}_j - n_{\text{eau}} \hat{M}_{\text{eau}}}{\sum_j n_j \hat{M}_j} = Y'_i (1 - Y_{\text{eau}})$$

En combinant les relations précédentes et celle de la masse molaire de mélange, on obtient une relation liant les fractions massiques et cette même grandeur :

$$\hat{M}'_I = \frac{(1 - Y_{g, \text{eau}, I})}{\sum_{i \neq \text{eau}} \frac{Y_{g, i, I}}{\hat{M}_i}}$$

Or, on sait que les fractions massiques de chaque espèce non évaporante obéissent à la relation suivante :

$$Y_{g, i, I} = \frac{\rho_{g, I} H_{M_g} Y_{g, i, \infty}}{(\dot{m}_g + \rho_{g, I} H_{M_g})}$$

En introduisant cette relation dans l'expression précédente et en utilisant la relation liant le débit massique et les fractions massiques :

$$\dot{m}_g = \frac{\rho_{g, I} H_{M_g} (Y_{g, \text{eau}, I} - Y_{g, \text{eau}, \infty})}{(1 - Y_{g, \text{eau}, I})}$$

On obtient l'expression suivante :

$$\hat{M}'_I = \frac{(1 - Y_{g, \text{eau}, \infty})}{\sum_{i \neq \text{eau}} \frac{Y_{g, i, \infty}}{\hat{M}_i}} = \hat{M}'_{\infty}$$

Il s'agit donc bien d'une donnée d'entrée du problème. Au final on obtient bien la relation

$$Y_{g, \text{eau}, I}(T_I) = \frac{x_{g, \text{eau}, I} \hat{M}_{\text{eau}}}{x_{g, \text{eau}, I} \hat{M}_{\text{eau}} + (1 - x_{g, \text{eau}, I}) \hat{M}'_{\infty}}$$

En se servant pour finir de l'équation d'état des gaz parfaits pour le mélange et du fait que,

$$\hat{M}'_I = x_{g, \text{eau}, I} \hat{M}_{\text{eau}} + (1 - x_{g, \text{eau}, I}) \hat{M}'_{\infty}$$

On obtient la deuxième relation de fermeture liant la densité de mélange côté gaz et la température T_I à l'interface.

Les relations $P_{\text{sat,eau}}(T_I)$ et $L_{v,\text{eau}}(T_I)$ sont fournies par le diagramme de phase du liquide considéré. Ce système comporte seulement $(N+2)$ inconnues : \dot{m}_g , T_I et $Y_{g,i}$ pour tout i .

Etant fortement non linéaire, ce système est néanmoins découplé. En effet, les deux premières relations suffisent à déterminer T_I puisque les autres grandeurs sont des fonctions explicites de la température T_I . En combinant ces deux relations, le système se réduit à une fonction scalaire dont il faut chercher le zéro par une méthode adaptée (Newton-Raphson par exemple) :

$$f(T_I) = \rho_{g,I}(T_I) H_{M_g} (Y_{g,\text{eau},I}(T_I) - Y_{g,\text{eau},\infty}) + \dot{m}_g(T_I) \times (Y_{g,\text{eau},I}(T_I) - 1) = 0$$

où

$$\dot{m}_g(T_I) = \frac{H_{T_l}(T_{l,\infty} - T_I) + H_{T_g}(T_{g,\infty} - T_I)}{L_{v,\text{eau}}(T_I)}$$

$$Y_{g,\text{eau},I}(T_I) = \frac{x_{g,\text{eau},I} \hat{M}_{\text{eau}}}{x_{g,\text{eau},I} \hat{M}_{\text{eau}} + (1 - x_{g,\text{eau},I}) \hat{M}'_{\infty}} = \frac{\hat{M}_{\text{eau}}}{\hat{M}_{\text{eau}} - \hat{M}'_{\infty} + \frac{P}{P_{\text{sat,eau}}(T_I)} \hat{M}'_{\infty}}$$

$$\rho_{g,I}(T_I) = \frac{(\hat{M}_{\text{eau}} - \hat{M}'_{\infty}) P_{\text{sat,eau}}(T_I) + P \hat{M}'_{\infty}}{\hat{R} T_I}$$

Une estimation initiale de la température d'interface pourrait être celle calculée avec $\dot{m}_g(T_I) = 0$:

$$T_I = \frac{H_{T_l} T_{l,\infty} + H_{T_g} T_{g,\infty}}{H_{T_l} + H_{T_g}}$$

Dès que la température T_I est connue après convergence, il est alors aisé d'en déduire les autres grandeurs par les relations explicites appropriées.

III.4 Modélisation 0D d'un écoulement multiphasique particulier en présence de transferts de masses et d'énergies

III.4.1 Système multiphasique à 7 équations

On revient maintenant sous un autre angle, sur la détermination des transferts de masse et d'énergie dans le cas de l'évaporation d'un liquide par chauffage. On considère uniquement ici un liquide (1) pouvant s'évaporer dans sa vapeur (2). L'application sera illustrée sur des cas simples. Pour simplifier les écritures et une meilleure lisibilité, on se place dans une formulation unidimensionnelle. Le modèle d'écoulement considéré ici est le modèle diphasique à 7 équations, totalement hors d'équilibre, avec deux vitesses, deux pressions, deux températures [3,4,5]. Ce modèle est inconditionnellement hyperbolique et permet la propagation des ondes dans les milieux diphasiques. Il s'écrit dans le cas général :

Phase 1 (liquide)

$$\frac{\partial \alpha_1}{\partial t} + u_1 \frac{\partial \alpha_1}{\partial x} = \mu(p_1 - p_2) - \frac{\dot{m}}{\tilde{\rho}_1}$$

$$\frac{\partial (\alpha \rho)_1}{\partial t} + \frac{\partial (\alpha \rho u)_1}{\partial x} = -\dot{m}$$

$$\frac{\partial (\alpha \rho u)_1}{\partial t} + \frac{\partial (\alpha \rho u^2 + \alpha p)_1}{\partial x} = p_1 \frac{\partial \alpha_1}{\partial x} + \lambda(u_2 - u_1) - \dot{m} \tilde{u}_1$$

$$\frac{\partial (\alpha \rho E)_1}{\partial t} + \frac{\partial (\alpha (\rho E + p) u)_1}{\partial x} = p_1 u_1 \frac{\partial \alpha_1}{\partial x} + \lambda u'_1 (u_2 - u_1) - \mu p'_1 (p_1 - p_2) + \dot{m} \frac{\tilde{p}_1}{\tilde{\rho}_1} - \dot{m} \tilde{H}_{1l} + h_{T1} (\tilde{T}_1 - T_1)$$

Phase 2 (vapeur)

$$\frac{\partial (\alpha \rho)_2}{\partial t} + \frac{\partial (\alpha \rho u)_2}{\partial x} = \dot{m}$$

$$\frac{\partial (\alpha \rho u)_2}{\partial t} + \frac{\partial (\alpha \rho u^2 + \alpha p)_2}{\partial x} = p_1 \frac{\partial \alpha_2}{\partial x} - \lambda(u_2 - u_1) + \dot{m} \tilde{u}_1$$

$$\frac{\partial (\alpha \rho E)_2}{\partial t} + \frac{\partial (\alpha (\rho E + p) u)_2}{\partial x} = p_1 u_1 \frac{\partial \alpha_2}{\partial x} - \lambda u'_1 (u_2 - u_1) + \mu p'_1 (p_1 - p_2) - \dot{m} \frac{\tilde{p}_1}{\tilde{\rho}_1} + \dot{m} \tilde{H}_{2l} + h_{T2} (\tilde{T}_1 - T_2)$$

avec les notations habituelles : α fraction volumique, ρ masse volumique, u vitesse, p pression,

H enthalpie totale E énergie totale ($E = e + \frac{1}{2}u^2$).

On note « h_T » les coefficients d'échanges thermiques entre les phases. Toutes les grandeurs comprenant un « $\tilde{}$ » sont relatives au mécanisme d'évaporation et/ou de transfert de chaleur : elles désignent des grandeurs interfaciales à l'état de saturation (lorsque le transfert de masse est activé).

NB: On peut compléter ce système par l'adjonction d'une équation permettant de décrire l'évolution du nombre de gouttes par unité de masse « n_g ». En l'absence de coalescence ou de fragmentation, cette équation s'écrit :

$$\frac{\partial (\alpha\rho)_1 n_g}{\partial t} + \text{div}((\alpha\rho)_1 n_g \bar{u}_1) = 0$$

Cette équation, nous le verrons par la suite, peut être utile notamment à la détermination de l'aire interfaciale, lieu des échanges thermiques puis éventuellement du transfert de masse entre un gaz et un nuage de gouttes. Cette aire interfaciale « A_I » est déduite du nombre de gouttes par unité de volume, lui-même calculé de la façon suivante. Si N_g désigne le nombre de gouttes par unité de volume, on a :

$$N_g = \alpha_g \rho_g n_g$$

où « n_g » est le nombre de gouttes par unité de masse. Par ailleurs, $A_I = N_g 4\pi r^2$ où r désigne le rayon d'une goutte. La relation $\alpha_g = \frac{4}{3}\pi r^3 N_g$ permet le calcul de n_g et de A_I .

Les analyses développées par Saurel et al. [140 à 146] ont conduit aux expressions suivantes pour les grandeurs interfaciales:

$$u_I = \frac{Z_1 u_1 + Z_2 u_2}{Z_1 + Z_2} + \text{sgn}\left(\frac{\partial \alpha_1}{\partial x}\right) \frac{p_2 - p_1}{Z_1 + Z_2}$$

$$p_I = \frac{Z_2 p_1 + Z_1 p_2}{Z_1 + Z_2} + \text{sgn}\left(\frac{\partial \alpha_1}{\partial x}\right) \frac{Z_1 Z_2}{Z_1 + Z_2} (u_2 - u_1)$$

Ces grandeurs correspondent aux vitesses et pressions qui s'appliquent sur les zones où des gradients de fraction volumique sont présents, et jouent un rôle particulièrement important sur les interfaces matérielles : satisfaction des conditions d'interfaces (égalité des pressions et des vitesses) lorsque deux fluides purs sont séparés par une interface. Les moyennes des pressions et vitesses d'interfaces qui s'appliquent au sein du volume de contrôle diphasique sont données par :

$$p'_I = \frac{Z_2 p_1 + Z_1 p_2}{Z_1 + Z_2} \quad u'_I = \frac{Z_1 u_1 + Z_2 u_2}{Z_1 + Z_2}$$

L'état d'équilibre, qui correspond dans ce système à l'égalité des pressions et des vitesses entre phases, est obtenu à l'issue d'un processus de relaxation des vitesses et des pressions.

Le coefficient de relaxation des pressions s'écrit : $\mu = \frac{A_I}{Z_1 + Z_2}$

Le coefficient de relaxation des vitesses est relié au coefficient de relaxation des pressions par $\lambda = \frac{1}{2}\mu Z_1 Z_2$ où A_I représente la surface d'échange par unité de volume et Z_k l'impédance acoustique de la phase k : $Z_k = \rho_k c_k$.

L'aire interfaciale spécifique A_I contient l'essentiel de la signature du mélange, notamment sa granulométrie.

III.4.2 Application à l'évaporation de phases liquides – modélisation 0D(t)

On considère maintenant le système simplifié qui doit être résolu lors de la prise en compte des transferts de chaleur et de masse : par rapport au système donné au paragraphe précédent, on ne conserve à droite que les termes liés au mécanisme d'évaporation, supposant résolus par ailleurs tous les termes de transport et de relaxation :

Phase 1 (liquide)

$$\frac{\partial \alpha_1}{\partial t} = -\frac{\dot{m}}{\tilde{\rho}_l}$$

$$\frac{\partial (\alpha\rho)_1}{\partial t} = -\dot{m}$$

$$\frac{\partial (\alpha\rho u)_1}{\partial t} = -\dot{m}\tilde{u}_l$$

$$\frac{\partial (\alpha\rho E)_1}{\partial t} = \dot{m}\frac{\tilde{p}_l}{\tilde{\rho}_l} - \dot{m}\tilde{H}_{1l} + h_{T1}(\tilde{T}_l - T_1)$$

Phase 2 (vapeur)

$$\frac{\partial (\alpha\rho)_2}{\partial t} = \dot{m}$$

$$\frac{\partial (\alpha\rho u)_2}{\partial t} = \dot{m}\tilde{u}_l$$

$$\frac{\partial (\alpha\rho E)_2}{\partial t} = -\dot{m}\frac{\tilde{p}_l}{\tilde{\rho}_l} + \dot{m}\tilde{H}_{2l} + h_{T2}(\tilde{T}_l - T_2)$$

Dans ce système,

- \dot{m} représente l'apport de masse que reçoit le gaz durant l'évaporation,
- h_{T1} représente le coefficient d'échange de chaleur au sein de la phase liquide, entre son 'cœur' et l'interface. Ce terme est important pour tenir compte de la non-homogénéité de la température dans la phase liquide. Il est aussi important pour tenir compte de l'échauffement du liquide jusqu'à la température de saturation.
- h_{T2} représente le coefficient d'échange de chaleur au sein de la phase gazeuse, entre son 'cœur' et l'interface. Ce terme est évidemment d'une importance capitale dans le processus d'évaporation par un gaz chaud.
- \tilde{T}_l représente la température d'interface.
- \tilde{H}_{1l} et \tilde{H}_{2l} représentent respectivement les enthalpies totales spécifiques du liquide et du gaz à l'interface.

Dans ce modèle, les coefficients d'échange h_1 et h_2 seront donnés par des corrélations adaptées, telles que décrites dans une section ultérieure. Les inconnues sont donc : \dot{m} , \tilde{T}_l , \tilde{H}_{1l} et \tilde{H}_{2l} . Leur détermination est effectuée dans deux cas limites : chauffage du liquide sans transfert de masse et évaporation.

a. Cas 1- Chauffage du liquide sans transfert de masse

Dans ce cas, $\dot{m} = 0$. La somme des membres de droite des équations d'énergie conduit à :

$$h_{T_1}(\tilde{T}_I - T_1) + h_{T_2}(\tilde{T}_I - T_2) = 0$$

Ceci permet la détermination de la température d'interface : $\tilde{T}_I = \frac{h_{T_1}T_1 + h_{T_2}T_2}{h_{T_1} + h_{T_2}}$

Si cette température d'interface est effectivement inférieure à la température de saturation, aucun transfert de masse ne peut se produire, ce qui confirme l'hypothèse initiale $\dot{m} = 0$. Dans ce cas, la connaissance des \tilde{H}_{kl} est inutile, puisque ces termes disparaissent des équations. L'échauffement du liquide, qui s'accompagne d'un refroidissement du gaz, est donc traité par le système suivant :

$$\frac{\partial \alpha_1}{\partial t} = 0$$

$$\frac{\partial (\alpha\rho)_1}{\partial t} = 0$$

$$\frac{\partial (\alpha\rho u)_1}{\partial t} = 0$$

$$\frac{\partial (\alpha\rho E)_1}{\partial t} = h_{T_1}(\tilde{T}_I - T_1)$$

$$\frac{\partial (\alpha\rho)_2}{\partial t} = 0$$

$$\frac{\partial (\alpha\rho u)_2}{\partial t} = 0$$

$$\frac{\partial (\alpha\rho E)_2}{\partial t} = h_{T_2}(\tilde{T}_I - T_2) \quad \text{avec } \tilde{T}_I = \frac{h_{T_1}T_1 + h_{T_2}T_2}{h_{T_1} + h_{T_2}}$$

Si par contre cette température est supérieure à la température de saturation à la pression courante ($T_{sat}(P)$), une partie du liquide est métastable et l'évaporation doit se produire.

b. Cas 2 - Evaporation

Dans ce cas la somme des membres de droite des équations d'énergie conduit à :

$$\dot{m}(\tilde{H}_{2I} - \tilde{H}_{1I}) + h_{T_1}(\tilde{T}_I - T_1) + h_{T_2}(\tilde{T}_I - T_2) = 0$$

On pose alors que la température d'interface est égale à la température de saturation (qui est conforme à hypothèse d'équilibre thermodynamique local déjà formulée) :

$$\tilde{T}_I = T_{sat}(P)$$

On en déduit pour l'équation d'état stiffened gas :

$$\tilde{H}_{2I} = \tilde{h}_{2sat} + \frac{1}{2}u_2^2 \quad \text{avec} \quad \tilde{h}_{2sat} = \gamma_2 C_{v2} T_{sat} + q_2 = C_{p2} T_{sat} + q_2$$

$$\tilde{H}_{1I} = \tilde{h}_{1sat} + \frac{1}{2}u_1^2 \quad \text{avec} \quad \tilde{h}_{1sat} = \gamma_1 C_{v1} T_{sat} + q_1 = C_{p1} T_{sat} + q_1$$

Ces définitions des énergies internes sont celles qui correspondent aux lois d'état de type stiffened gas élaborées par Le Metayer et al. [143] : les constantes q_1 et q_2 représentent les énergies de formation du liquide et de la vapeur, respectivement ($q_1 = h_{01}$, $q_2 = h_{02}$). La condition d'interface en énergie devient ainsi :

$$\dot{m} \left(\tilde{h}_{2I} - \tilde{h}_{1I} + \frac{1}{2}(u_2^2 - u_1^2) \right) + h_{T1}(\tilde{T}_I - T_1) + h_{T2}(\tilde{T}_I - T_2) = 0$$

Par ailleurs, la différence des enthalpies correspond exactement à la chaleur latente de vaporisation : $\tilde{h}_{2I} - \tilde{h}_{1I} = L_v(\tilde{T}_I)$.

On déduit de la condition d'interface l'expression du débit de vapeur :

$$\dot{m} = - \frac{h_{T1}(\tilde{T}_I - T_1) + h_{T2}(\tilde{T}_I - T_2)}{\tilde{h}_{2I} - \tilde{h}_{1I} + \frac{1}{2}(u_2^2 - u_1^2)} = \frac{h_{T1}(\tilde{T}_I - T_1) + h_{T2}(\tilde{T}_I - T_2)}{L_v(\tilde{T}_I) + \frac{1}{2}(u_2^2 - u_1^2)}$$

Le système qui est résolu dans ce cas s'écrit :

$$\frac{\partial \alpha_1}{\partial t} = - \frac{\dot{m}}{\tilde{\rho}_I}$$

$$\frac{\partial (\alpha \rho)_1}{\partial t} = - \dot{m}$$

$$\frac{\partial (\alpha \rho u)_1}{\partial t} = - \dot{m} \tilde{u}_I$$

$$\frac{\partial (\alpha \rho E)_1}{\partial t} = \dot{m} \frac{\tilde{p}_I}{\tilde{\rho}_I} - \dot{m} \tilde{H}_{1I} + h_{T1}(\tilde{T}_I - T_1)$$

$$\frac{\partial (\alpha \rho)_2}{\partial t} = \dot{m}$$

$$\frac{\partial (\alpha \rho u)_2}{\partial t} = \dot{m} \tilde{u}_I$$

$$\frac{\partial (\alpha \rho E)_2}{\partial t} = - \dot{m} \frac{\tilde{p}_I}{\tilde{\rho}_I} + \dot{m} \tilde{H}_{2I} + h_{T2}(\tilde{T}_I - T_2)$$

avec

$$\dot{m} = - \frac{h_{T1}(\tilde{T}_I - T_1) + h_{T2}(\tilde{T}_I - T_2)}{\tilde{H}_{2I} - \tilde{H}_{1I}}, \quad \tilde{T}_I = T_{sat}(P)$$

et on suppose : $\tilde{\rho}_I = \rho_{1I}$ (densité saturée de la phase la moins compressible).

En toute rigueur, $\tilde{\rho}_l$ devrait être représentée par une densité que l'on pourrait qualifier de « densité de transfert ». La détermination de cette grandeur reste un problème ouvert à ce jour, qui fait par ailleurs l'objet d'investigations.

III.3.2.3 Lois d'évaporation.

Regardons maintenant plus précisément les lois d'évaporation contenues dans le système précédent sur notre cas particulier : un milieu diphasique constitué de gouttes homogènes entourées de vapeur. Pour cela, nous reprenons la relation traduisant l'évolution temporelle de la fraction volumique de la phase liquide :

$$\frac{\partial \alpha_1}{\partial t} = -\frac{\dot{m}}{\tilde{\rho}_l}$$

La relation liant la fraction volumique α_1 , le rayon r d'une goutte et le nombre de gouttes par unité de volume N_1 s'exprime : $\alpha_1 = \frac{4}{3}\pi r^3 N_1$

En dérivant par rapport au temps cette équation, nous obtenons :

$$\frac{\partial \alpha_1}{\partial t} = 4\pi r^2 \frac{\partial r}{\partial t} N_1$$

car le nombre de gouttes par unité de volume reste constant dans ce cas (on suppose qu'il n'y a ni coalescence ni fragmentation). En remarquant que le terme $4\pi r^2 N_1$ n'est autre que la surface d'échange par unité de volume, on peut écrire : $\frac{\partial \alpha_1}{\partial t} = A_l \frac{\partial r}{\partial t}$

En combinant la relation précédente et celle portant sur la fraction volumique de liquide, il vient :

$$A_l \frac{\partial r}{\partial t} = -\frac{\dot{m}}{\tilde{\rho}_l}$$

En prenant l'expression du débit masse : $\dot{m} = -\frac{h_{T1}(\tilde{T}_l - T_1) + h_{T2}(\tilde{T}_l - T_2)}{L_v(\tilde{T}_l)}$, on obtient :

$$A_l \frac{\partial r}{\partial t} = -\frac{h_{T1}(\tilde{T}_l - T_1) + h_{T2}(\tilde{T}_l - T_2)}{\tilde{\rho}_l L_v(\tilde{T}_l)}$$

Par ailleurs, en se basant sur des corrélations liées au nombre de Nusselt $h_{T1} = \frac{A_l \lambda_1 (Nu)_1}{2r}$ et

$h_{T2} = \frac{A_l \lambda_2 (Nu)_2}{2r}$, la relation précédente devient :

$$\frac{\partial r}{\partial t} = -\frac{\lambda_1 (Nu)_1 (\tilde{T}_l - T_1) + \lambda_2 (Nu)_2 (\tilde{T}_l - T_2)}{2r \tilde{\rho}_l L_v(\tilde{T}_l)}$$

Cette relation peut également se réécrire :

$$\frac{\partial r^2}{\partial t} = -\frac{\lambda_1 (Nu)_1 (\tilde{T}_l - T_1) + \lambda_2 (Nu)_2 (\tilde{T}_l - T_2)}{\tilde{\rho}_l L_v(\tilde{T}_l)}$$

En partant des mêmes équations, une autre écriture possible de la variation du rayon de la goutte en fonction du temps est par exemple :

$$\frac{\partial r}{\partial t} = -\frac{\dot{m}}{4\pi r^2 N_1 \rho_1} - \frac{r}{3\rho_1} \frac{\partial \rho_1}{\partial t}$$

Le deuxième terme du membre de droite traduit les effets de la compressibilité du liquide durant le processus d'évaporation, qui sont négligés dans la plupart des applications.

Nous avons évoqué l'existence dans la littérature de lois du type précédent, dites « loi en D² », obtenues dans des cas limites. Par exemple, en supposant que les flux de chaleur et la température d'interface ne varient pas, cette loi devient :

$$\frac{\partial r^2}{\partial t} = -\frac{\lambda_1 (Nu)_1 (\tilde{T}_l - T_1) + \lambda_2 (Nu)_2 (\tilde{T}_l - T_2)}{\tilde{\rho}_l L_v (\tilde{T}_l)} = cste$$

ce qui veut dire que r^2 évolue linéairement par rapport au temps.

Il est important de remarquer que, dans notre approche, cette loi ne constitue pas un point de départ de notre analyse mais une conséquence directe de la modélisation. En effet, ces lois de régression, beaucoup plus générales dans notre cas, font partie intégrante de façon implicite de notre modèle de départ.

Les figures ci-dessous illustrent les lois précédentes pour une évaporation partielle d'une goutte liquide :

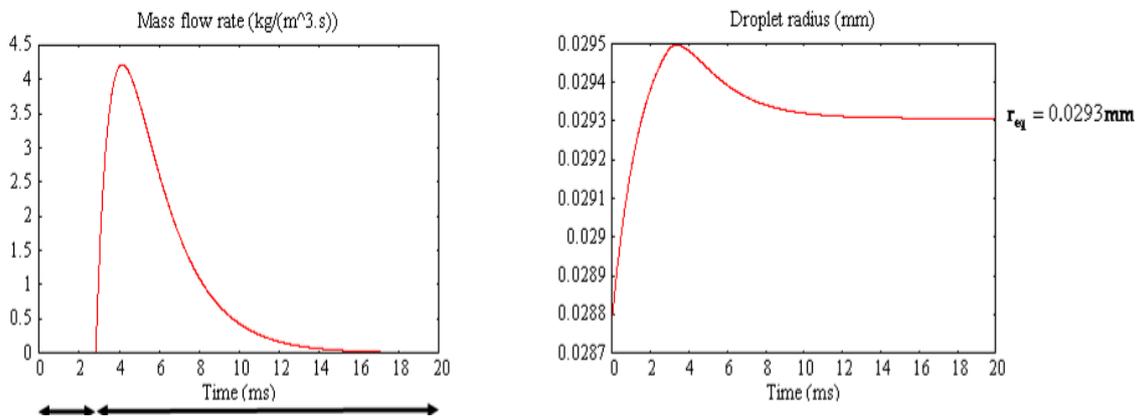


Figure III.11 Evolution du taux d'évaporation (à gauche) et du rayon d'une gouttelette (à droite) en fonction du temps

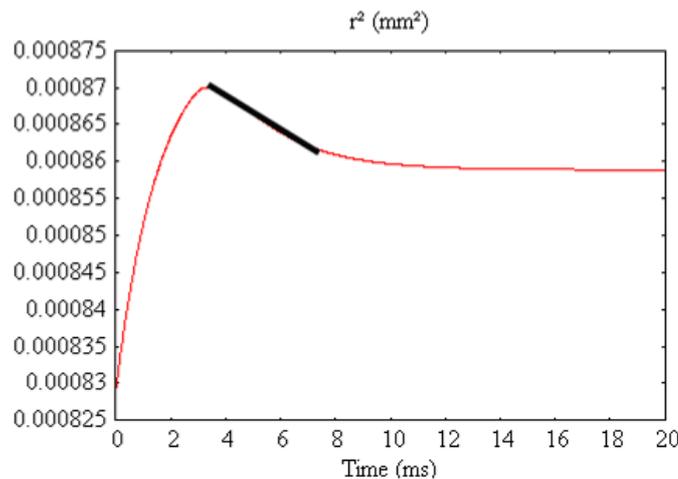


Figure III.12 Représentation graphique de l'évolution temporelle du carré du rayon de la goutte

Sur la figure III.12, en noir apparaît la zone de dépendance linéaire de r^2 par rapport au temps. Dans cette zone, l'hypothèse de flux de chaleur et de température de surface constants peut être formulée.

III.4.3 Résultats et validation du modèle : modélisation de l'évaporation de gouttes

On donne dans ce chapitre les résultats de quelques cas test de validation du modèle ci-dessus. Le système considéré n'est pas composé d'une goutte mais d'un nuage de gouttes.

III.4.3.1 Evaporation totale d'un nuage de gouttes d'eau dans sa vapeur

On se donne un volume fixé contenant un nuage de gouttes d'eau initialement à 300K dans sa vapeur à 3000K sous une pression de 2 bar. Ces données sont retenues pour permettre à la vapeur de contenir au départ l'énergie suffisante pour pouvoir vaporiser l'intégralité du liquide.

Les gouttes ont un rayon initial de $R = 1\mu m$. La surface d'échange n'est pas explicitement calculée, elle est fixée à la valeur unitaire.

Strictement, les coefficients de transfert de chaleur sont calculés par les formules suivantes :

$$h_{T1} = \frac{A_I \lambda_1 (Nu)_1}{2r} \text{ et } h_{T2} = \frac{A_I \lambda_2 (Nu)_2}{2r}$$

où $(Nu)_1 = 10$, $\lambda_1 = 0.6 W / (m.K)$,
 $(Nu)_2 = 2$ et $\lambda_2 = 0.04 W / (m.K)$.

Pour une surface d'échange unitaire, les coefficients d'échanges thermiques valent donc du coté liquide $h=3.10^6 W/m^2/K$ et vapeur $h=4.10^4 W/m^2/K$.

Ces valeurs sont maintenues constantes au cours des simulations, de même que la température de saturation de l'eau, fixée à 373K.

La fraction volumique d'eau liquide est prise ici à 1.10^{-4} . Le temps final de calcul est de 0.012 s.

L'eau liquide est régie par la loi d'état stiffened gas, dont les paramètres sont :

$$\gamma_1 = 2.35 \quad , p_{\infty 1} = 10^9 Pa \quad , C_{v1} = 1816 J / Kg / K \quad , q_1 = -1.167 MJ / Kg$$

La vapeur est régie par la même loi d'état, avec les paramètres :

$$\gamma_2 = 1.43 \quad , p_{\infty 2} = 0 \quad , C_{v2} = 1040 J / Kg / K \quad , q_2 = 2.03 MJ / Kg$$

Les résultats obtenus sont les données sous formes de courbes représentant les évolutions temporelles respectives :

- de la fraction volumique de liquide et du débit masse,
- des températures de l'eau et de la vapeur,
- des pressions,
- et de la densité de vapeur.

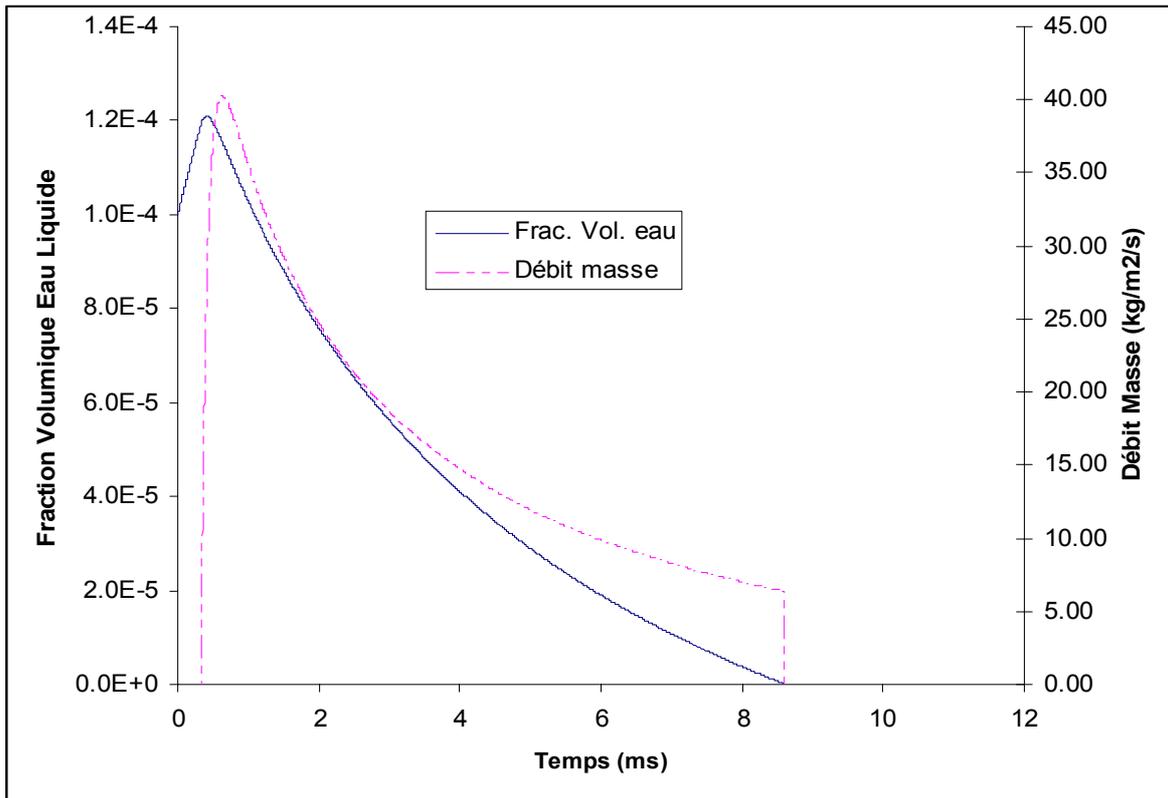


Figure III.13 Cas n°1 Fraction volumique de liquide et Débit Masse

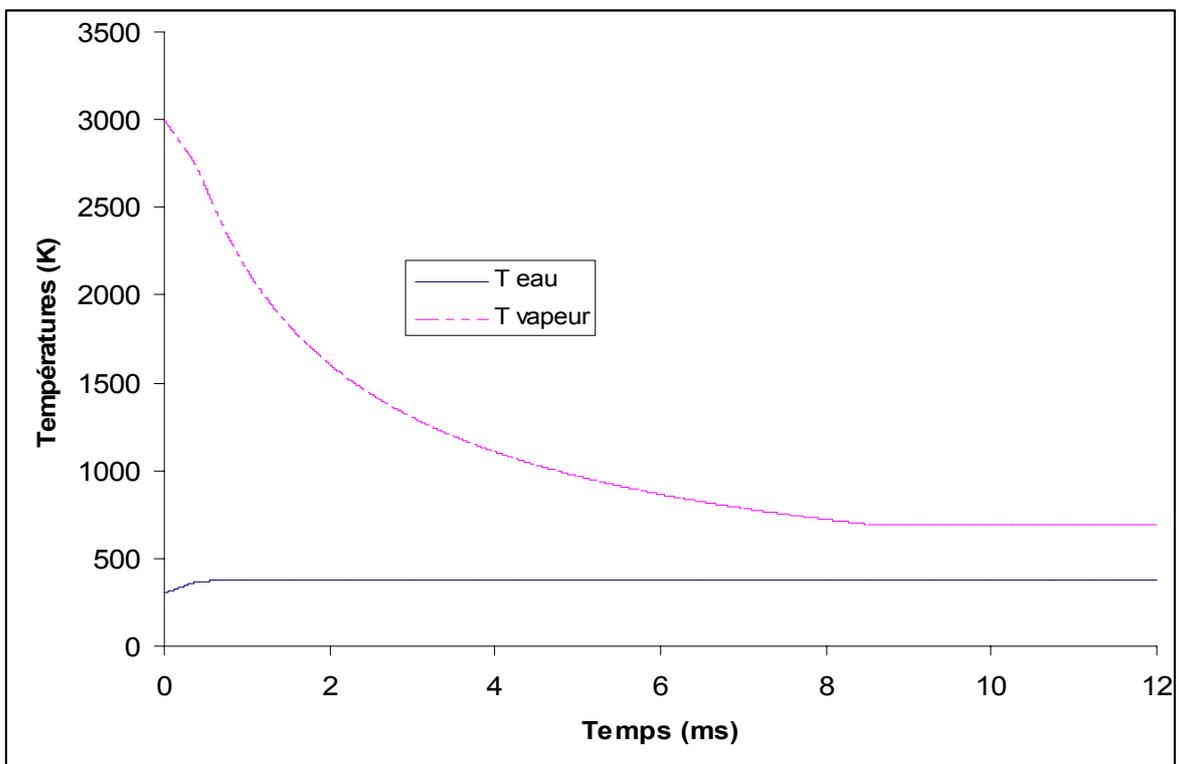


Figure III.14 Cas n°1 Evolution des températures en fonction du temps

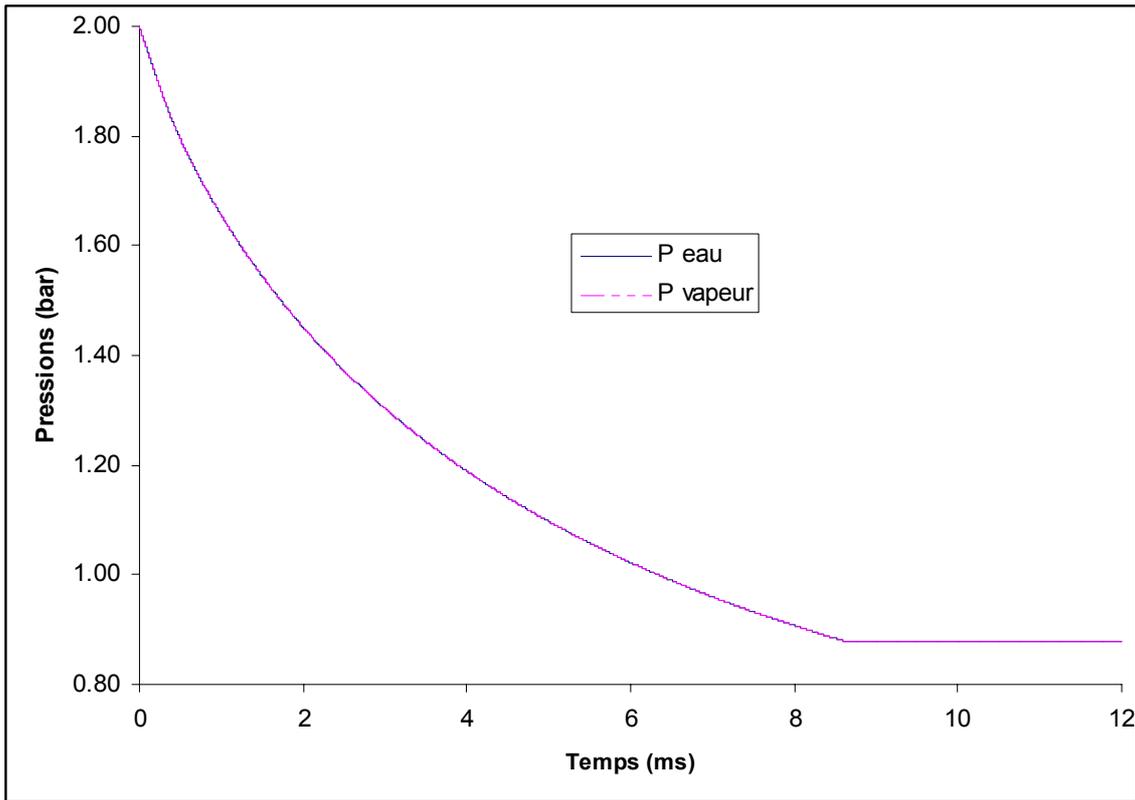


Figure III.15 Cas n°1 Evolution des pressions en fonction du temps

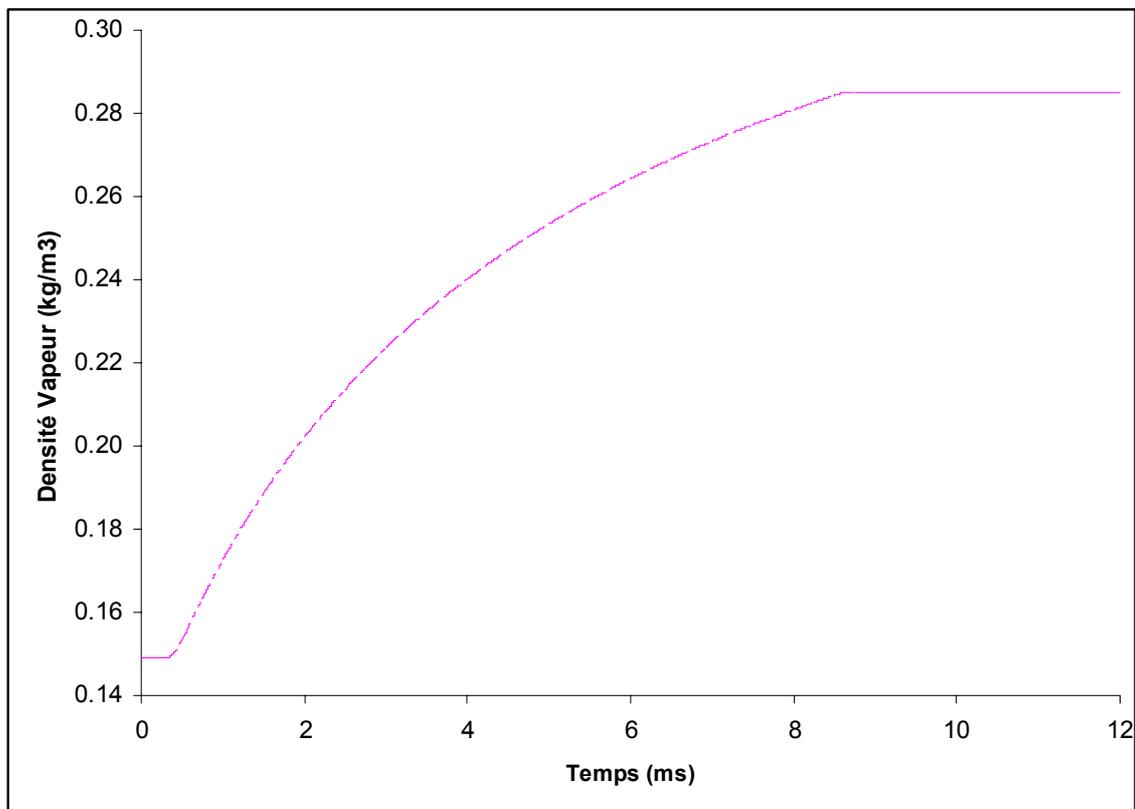


Figure III.16 Cas n°1 Densité de Vapeur en fonction du temps

Les figures III.13 à III.16 montrent la chronologie des phénomènes. Après une phase de chauffage, l'eau atteint la température de saturation, qu'elle ne peut dépasser et le changement de phase débute (autour de 0.33ms). La température de l'eau reste désormais constante alors que celle du gaz continue de diminuer, ce dernier fournissant à l'eau l'énergie dont elle a besoin pour changer de phase. La perte d'énergie liée à ce changement de phase l'emporte sur la compression de la vapeur par apport de masse, de sorte que, dans cette expérience à volume constant, on voit la pression et la température de la vapeur chuter pendant toute la durée du changement de phase. Lorsqu'il n'y a plus de liquide à « consommer », le débit masse s'annule (autour de 8.6ms), et dès lors une situation d'équilibre s'établit car le volume contient désormais uniquement de la vapeur d'eau. On note sur les figures les variables d'équilibre fournies par le code calcul : 690K pour la température, 0.285 kg/m³ pour la densité et 0.88 bar pour la pression de vapeur. On peut vérifier ces valeurs analytiquement. En effet, on travaille ici à volume constant et parfaitement isolé (adiabatique). L'ensemble de l'eau a été consommé par la transition de phase. On détermine les densités et énergies initiales du liquide et de la vapeur à partir de l'équation d'état « stiffened gas » et des paramètres respectifs de ces milieux, pour la pression et les températures données.

Pour chaque phase (k) :

$$\rho_k(P_k, T_k) = \frac{P_k + P_{\infty k}}{(\gamma_k - 1)C_{vk}T_k}$$

Et $e_k(\rho_k, T_k) = \frac{P_k + \gamma_k P_{\infty k}}{(\gamma_k - 1)\rho_k} + q_k$

De ces grandeurs, on déduit la densité et l'énergie du système à partir de la connaissance des fractions volumiques initiales du milieu :

$$\rho = \sum_k \alpha_k \rho_k \quad \text{et} \quad \rho e = \sum_k \alpha_k \rho_k e_k$$

Dans un volume fixé et isolé, ces grandeurs doivent se conserver. Ainsi, dans l'hypothèse où l'ensemble du liquide est devenu vapeur, « ρ » représente directement la densité finale de la vapeur, « e » son énergie. En substituant les variables par les valeurs numériques du cas test, on obtient pour l'état final de la vapeur : $\rho = 0.285 \text{ kg/m}^3$ et $e \approx 2.75 \text{ MJ/kg}$.

Soit, en utilisant la loi d'état de la vapeur, une pression de 0.879 bar et une température de 689.5 K. On retrouve ainsi les valeurs fournies par le code de calcul.

On peut par ailleurs remarquer que ces résultats (état stationnaire) sont indépendants des modèles de transferts thermiques ou du modèle d'évaporation utilisés : seule la dynamique des phénomènes est modifiée par le choix de ces modèles.

III.4.3.2 Evaporation partielle d'un nuage de gouttes d'eau dans sa vapeur

On reprend l'intégralité des données du cas test précédent, exception faite de la température initiale de vapeur qui est maintenant fixée à 1000K. Dans ce cas, l'énergie disponible dans la phase vapeur initialement est insuffisante en regard de celle nécessaire à l'évaporation totale du liquide. Les résultats sont les suivants :

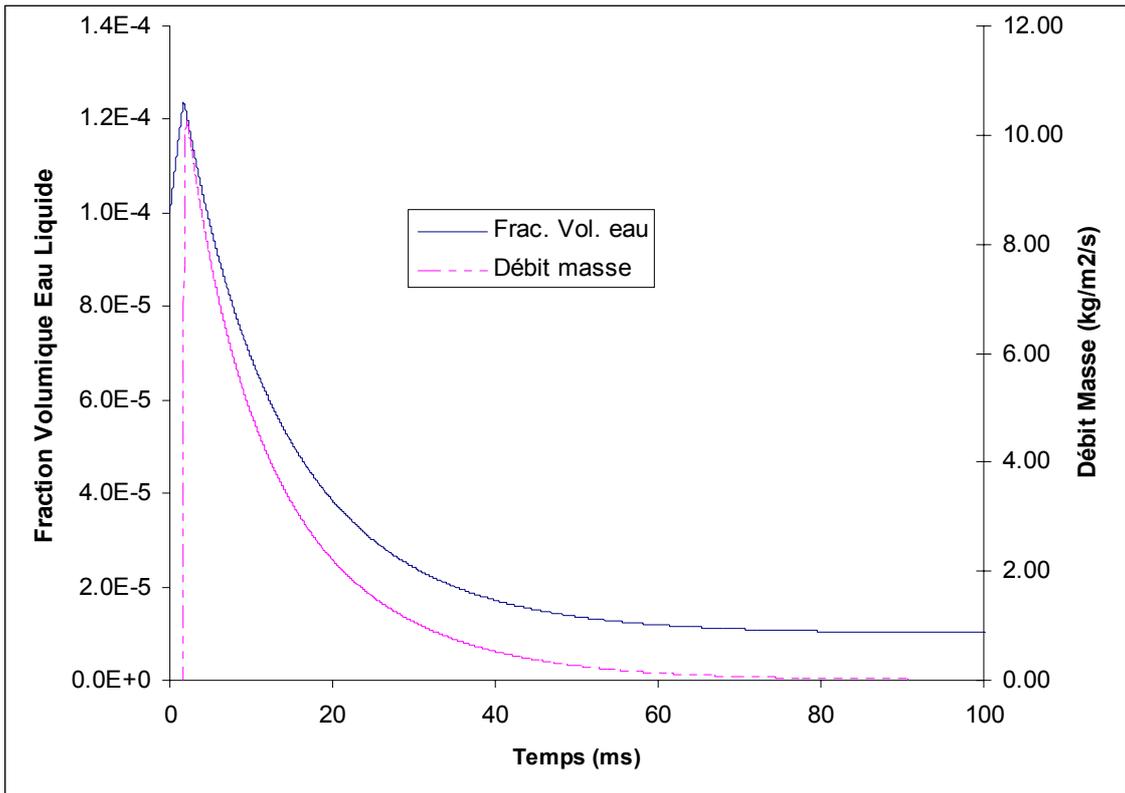


Figure III.17 Cas n°2 Fraction volumique de liquide et Débit Masse en fonction du temps

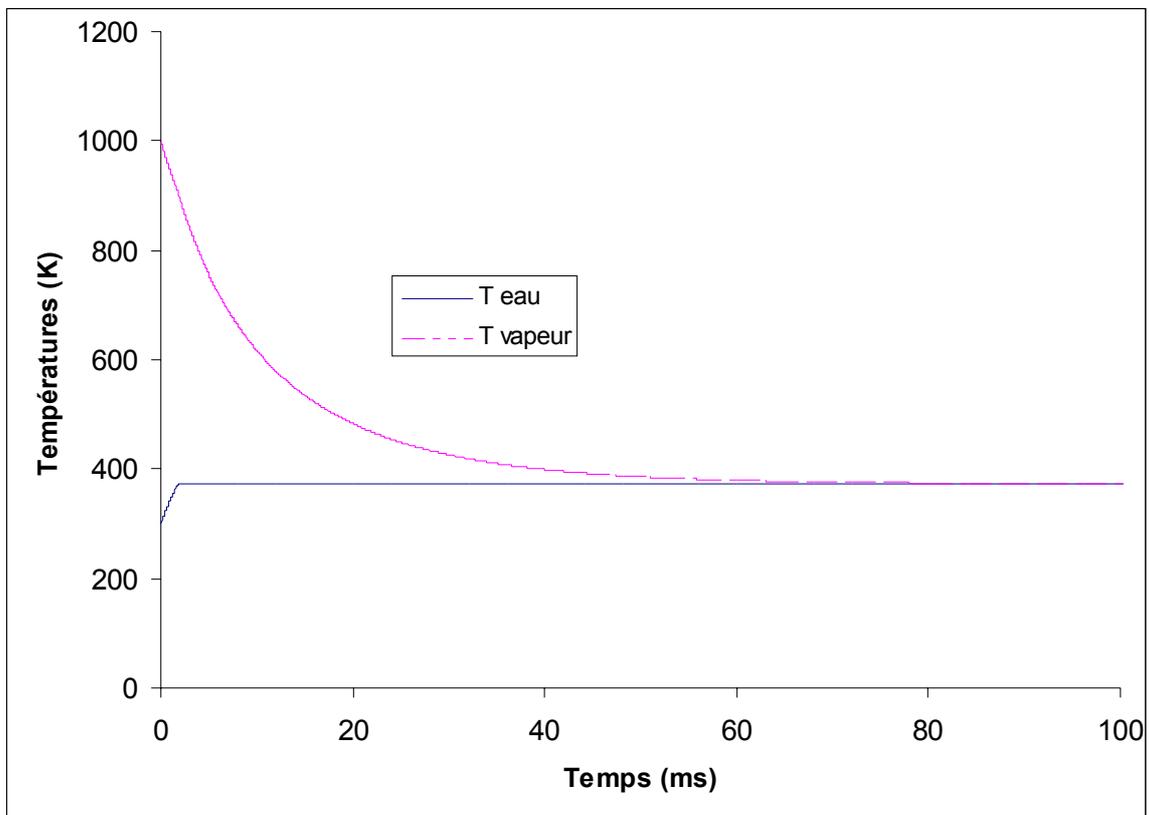


Figure III.18 Cas n°2 Evolution des Températures en fonction du temps

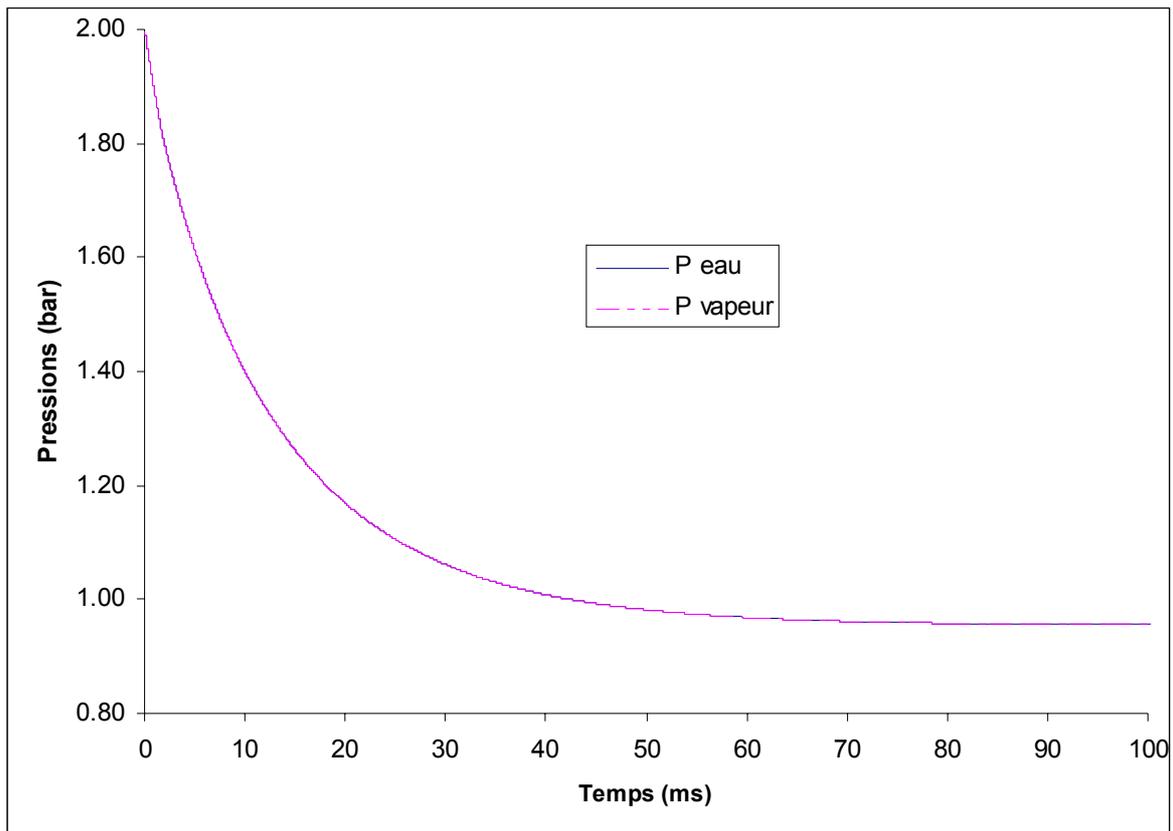


Figure III.19 Cas n°2 Evolution des pressions en fonction du temps

On voit sur les courbes de température l'échauffement du liquide jusqu'à la température de saturation, température à laquelle il se stabilise. Le gaz rejoint la même température et apparaît un débit masse d'évaporation du liquide vers le gaz. Ce débit masse augmente, puis diminue car la différence de température entre les deux phases diminue. Lorsqu'elle s'annule, le débit masse disparaît aussi. La totalité du liquide n'est pas évaporée sur ce cas test. L'énergie initiale de la vapeur n'est pas suffisante pour évaporer l'ensemble du liquide lorsque l'équilibre est atteint.

On peut aller plus loin en ce sens en mettant initialement plus de liquide dans le système (on porte la fraction volumique de liquide à 10^{-3} , les autres données restant par ailleurs identiques).

Les résultats obtenus sont présentés sur les figures III.20 et III.21. Dans ce dernier cas présenté, on constate clairement que l'énergie contenue dans la vapeur était insuffisante pour échauffer le liquide jusqu'à sa température de saturation (373K). Le gaz et le liquide, en raison des transferts thermiques, tendent vers une température commune autour de 350K, puis un équilibre s'établit à ce niveau, équilibre observé identiquement sur les autres grandeurs. La transition de phase ne peut donc pas avoir lieu dans ces conditions.

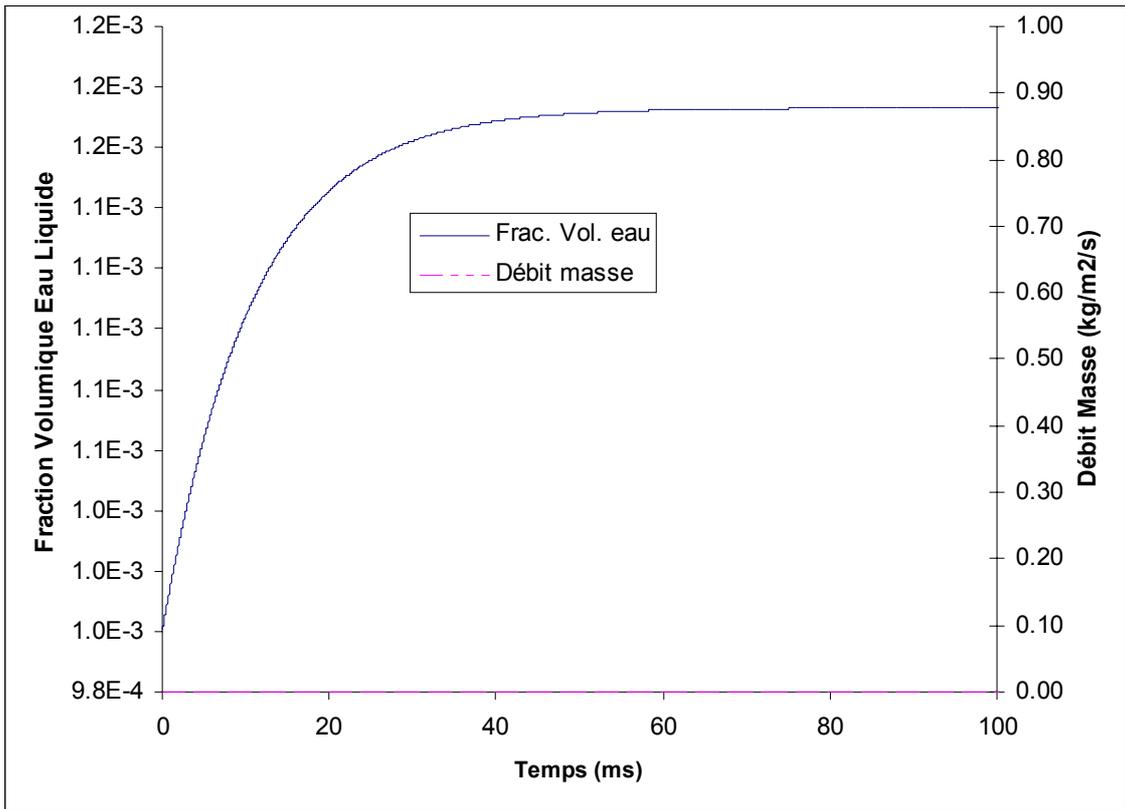


Figure III.20 Cas n°3 Fraction volumique de liquide et Débit Masse

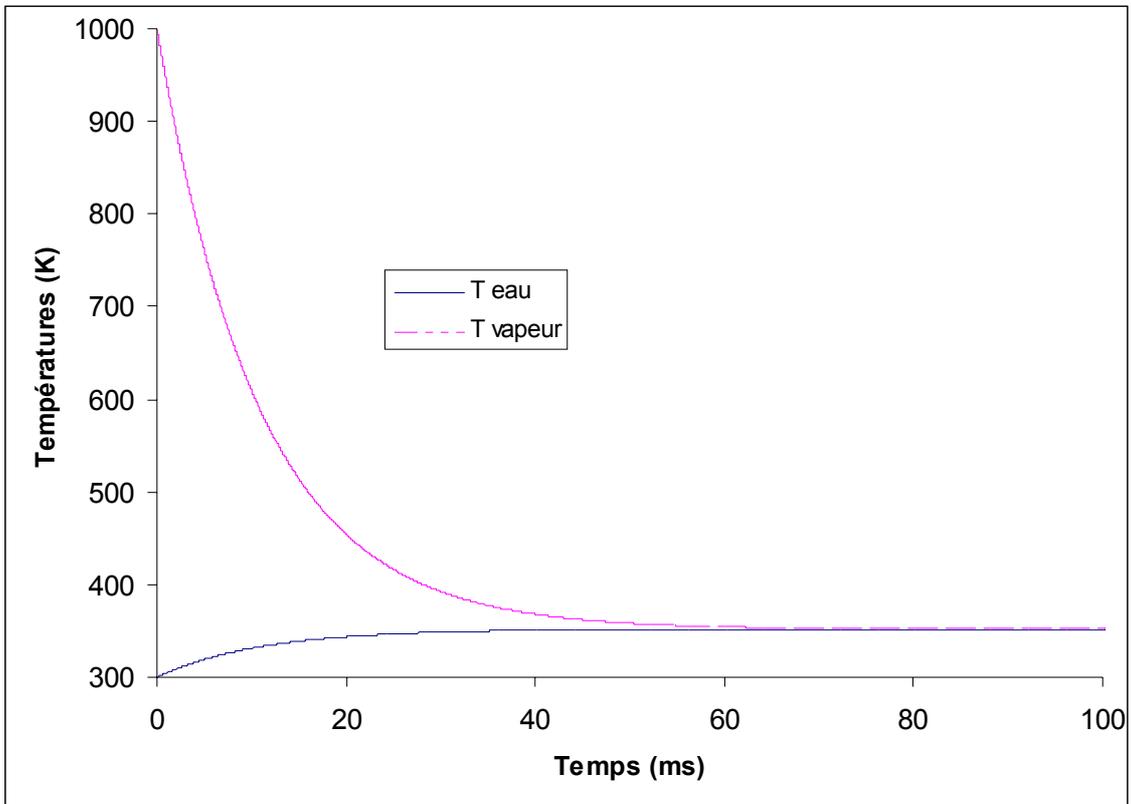


Figure: III.21 Cas n°3 Evolution des températures en fonction du temps

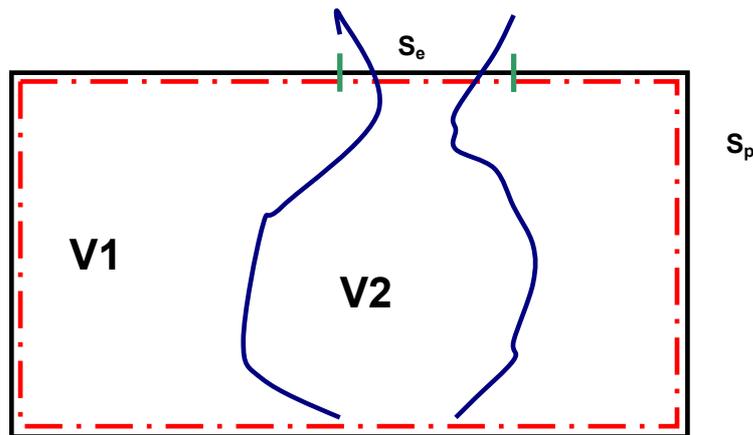
III.5 Modélisation 0D d'une explosion en milieu clos ou partiellement ouvert en présence de produit liquide

Après avoir donné les éléments suffisants pour traiter l'évaporation d'une phase liquide et avoir examiné sur des cas simples la dynamique de ce processus, on va maintenant aborder la modélisation du problème complet, c'est à dire le comportement d'une phase liquide injectée dans une phase gazeuse portée à pression et température élevées à la suite de la détonation d'une charge explosive, ainsi que l'éjection potentielle du mélange diphasique résultant vers l'extérieur.

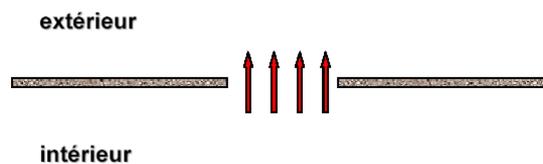
III.5.1 Hypothèses

On rappelle tout d'abord que l'objectif des travaux est la construction d'un modèle dit intégral – différentiel, traduisant ce couplage. « Integro » car le modèle est construit à partir de l'intégration sur un volume de contrôle V des équations régissant les deux phases, « différentiel » car le cœur du problème réside dans le couplage temporel des phénomènes. La clef est la réduction d'un problème purement 3D en une modélisation 0D instationnaire.

On étudie alors le cas d'une seule pièce, de volume total V constant. On dénote V_k le volume occupé par la phase k . Les équations sont construites pour un système de k phases et i espèces. Typiquement, dans le cas de la présence de gaz (1) et de liquide (2), le volume V est égal à la somme $V_1 + V_2$.



Le domaine est délimité par ses parois de surface totale S_p . La brèche de communication vers l'extérieur, considéré comme un milieu à pression et température ambiante constantes, a une surface projetée S_e à travers laquelle s'échappe le rejet. D'autre part S_e est très inférieur à S_p . L'écoulement au travers de la brèche doit être connu en termes de débit massique et de fractions de constituants éjectés. Il est également vu comme un écoulement monodimensionnel.



Les parois sont également considérées comme indéformables, de dimensions finies. Elles sont non catalytiques mais a priori non adiabatiques. Les phénomènes de germination et de condensation aux parois seront évoqués plus loin dans ce document.

On formule les hypothèses suivantes, cohérentes ou identiques à celles déjà formulées, ou propres au problème posé :

- le comportement de chaque phase est régi par les équations de la mécanique des fluides pour un milieu compressible ;
- les fluides en présence suivent une équation d'état de type stiffened gas : $P = (\gamma - 1)\rho e - \gamma P_\infty$

Une telle équation d'état permet d'exprimer directement la pression en fonction de l'énergie interne et de la masse volumique.

- le modèle n'est pas a priori isobare : selon les solutions de modélisation, il y aura localement égalité de pression entre la phase L et la phase G, afin notamment de simplifier l'écriture des équations de conservation Cette hypothèse se justifie notamment par le fait que les mécanismes modélisés se déroulent localement à pression quasi – constante.
- le modèle n'est pas isotherme, $T_1 \neq T_2$;
- on suppose aussi que les coefficients de diffusion massique des espèces au sein d'une même phase D_{ki} sont égaux (diffusion de l'espèce majoritaire) : $D_{ki} = D_k$
- Enfin, les vitesse moyennes des phases sont globalement nulles quel que soit t mais peuvent être localement différentes,

$$\bar{u}_1 = \bar{u}_2 = 0$$

A chaque pas de temps, les échanges entre phases sont pilotés par les surfaces d'échanges et d'autre part, par un ensemble de coefficients, pour lesquels l'élaboration de sous – modèles corrélés en fonction des conditions ambiantes est requise (nombres de Re, Nu, Pr, etc.). Les produits en présence sont considérés dans ce chapitre comme inertes du point de vue des réactions chimiques : On néglige toute réaction entre les constituants, et plus particulièrement les réactions de combustion. Les taux de production de nouvelles espèces sont donc nuls. De plus, en première approximation, on néglige les phénomènes de deuxième ordre : dépendance de la diffusivité massique et de la conductivité thermique par rapport à la température et la concentration des espèces.

III.5.2 Intégration des équations de conservation sur le volume V

La construction du modèle repose tout d'abord sur l'intégration des équations de la dynamique des fluides (pour un écoulement à k phases et i espèces) sur le volume V défini ci-dessus.

III.5.2.1 Equation de conservation de la masse

Pour alléger l'écriture, l'équation [a] peut s'écrire sous la forme :

$$\frac{\partial \rho Y}{\partial t} + \text{div}(\rho Y \vec{u} + \vec{J}) = 0$$

en ne perdant pas de vue au cours des développements la restriction de cette égalité à l'espèce i de la phase k. En multipliant l'équation ci-dessus par la fonction caractéristique X_k ,

$$X_k \left[\frac{\partial \rho Y}{\partial t} + \text{div}(\rho Y \vec{u} + \vec{J}) \right] = 0$$

Le premier terme de l'équation de conservation de la masse devient alors:

$$\begin{aligned} X_k \cdot \left[\frac{\partial \rho Y}{\partial t} \right] &= \frac{\partial}{\partial t} (\rho Y X_k) - \rho Y \frac{\partial X_k}{\partial t} \\ &= \frac{\partial}{\partial t} (\rho Y X_k) + \rho Y \vec{u}_I \cdot \vec{\nabla} X_k \end{aligned}$$

car par définition, $\frac{\partial X_k}{\partial t} = -\vec{u}_I \cdot \vec{\nabla} X_k$

Le terme en divergence devient:

$$X_k \cdot [\text{div}(\rho Y \vec{u} + \vec{J})] = \text{div}([\rho Y \vec{u} + \vec{J}] X_k) - (\rho Y \vec{u} + \vec{J}) \cdot \vec{\nabla} X_k$$

L'équation de conservation de l'espèce i dans la phase k s'écrit au final sous la forme :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho Y X) + \text{div}([\rho Y \vec{u} + \vec{J}] X) = (\rho Y (\vec{u} - \vec{u}_I) + \vec{J}) \cdot \vec{\nabla} X$$

Dans cette équation apparaît à nouveau la différence des vecteurs vitesses $\hat{\vec{u}} = \vec{u} - \vec{u}_I$, ce qui revient à exprimer la vitesse de l'écoulement dans le repère de l'interface entre les deux phases.

On va maintenant intégrer cette équation sur le volume V du système observé. Cette intégration doit permettre de construire un modèle moyenné sur les volumes respectifs des phases, V_k . Le volume V étant fixe dans le temps, on peut commuter les opérations d'intégration temporelle et spatiale :

$$\int_V \frac{\partial X \rho Y}{\partial t} dV = \frac{\partial}{\partial t} \int_V X \rho Y dV$$

Comme X est non nul uniquement au sein de la phase k et égal à 1,

$$\int_V \frac{\partial X \rho Y}{\partial t} dV = \frac{\partial}{\partial t} \int_{V_k} (\rho Y)_k dV$$

Par définition, $\overline{(\rho_k Y_k)} = \frac{1}{V_k} \int_{V_k} (\rho Y)_k dV$ d'où, au final,

$$\int_V \frac{\partial X \rho Y}{\partial t} dV = \frac{\partial}{\partial t} (V_k \overline{\rho_k Y_k})$$

En rappelant ici les indices occultés pour alléger l'écriture, on obtient :

$$\int_V \frac{\partial X_k \rho_k Y_{k,i}}{\partial t} dV = \frac{\partial}{\partial t} (V_k \overline{\rho_k Y_{k,i}})$$

Traisons maintenant le terme de divergence du membre de gauche de l'équation [y]. Puis, d'après le théorème de Gauss – Ostrogradsky,

$$\int_V \text{div}([\rho Y \vec{u} + \vec{J}] X) dV = \int_S [\rho Y \vec{u} + \vec{J}] X \cdot \vec{n} dS$$

Où S représente la surface totale délimitant le volume d'intégration, et \vec{n} la normale sortante à S en tout point. Or $S = S_p + S_e$ comme nous l'avons défini dans nos hypothèses. Les deux surfaces doivent être traitées séparément.

a. Intégration sur la surface S_p , parois du domaine de volume V

$$\int_{S_p} X(\rho Y \vec{u} + \vec{J}) \cdot \vec{n} dS = \int_{S_p} X \rho Y \vec{u} \cdot \vec{n} dS + \int_{S_p} X \vec{J} \cdot \vec{n} dS$$

Le terme de flux convectif et le terme de flux diffusif, traduisant les mécanismes de condensation/production/disparition aux parois, sont examinés séparément. Que les fluides soient considérés comme visqueux ou non, la condition de paroi impose

$$\vec{u} \cdot \vec{n} = 0$$

Le terme convectif est donc nul. Par contre, le terme diffusif doit traduire les transferts de l'espèce i de la phase k au niveau de S_p .

On considère tout d'abord une espèce i appartenant à la phase gazeuse. Soit i est une espèce condensable, soit i est inerte de ce point de vue.

Si i n'est pas condensable, les parois étant par hypothèse non catalytiques, $J_{gi} = 0$ au niveau de la paroi.

Si i est condensable, on suppose que le germe liquide existe quel que soit t . Dès lors, $X_g = 0$, ce qui signifie que la condensation se produira sur l'interface liquide – gaz et non sur la paroi elle-même. Pour la phase liquide, $X_l = 1$, mais les gradients de concentration au sein de cette phase sont supposés nuls, ce qui est rigoureusement vrai si la phase est pure. Les gradients sont considérés comme négligeables si cette phase est un mélange de liquides.

Au final, quelle que soit la phase, liquide ou gaz,

$$\int_{S_p} X(\rho Y \vec{u} + \vec{J}) \cdot \vec{n} dS = 0$$

b. Traitement de la brèche (surface de fuite vers l'extérieur) de surface S_e

Reste maintenant à calculer les échanges au niveau de la surface de fuite de surface S_e :

$$\int_{S_e} X(\rho Y \vec{u} + \vec{J}) \cdot \vec{n} dS = \int_{S_e} X \rho Y \vec{u} \cdot \vec{n} dS + \int_{S_e} X \vec{J} \cdot \vec{n} dS$$

On néglige ici le terme de flux diffusif, la vitesse caractéristique des phénomènes associés étant très inférieure à la vitesse supposée d'éjection des fluides vers l'extérieur. En d'autres termes, ce deuxième terme constitue une condition limite dont les effets sont négligeables par rapport au transfert convectif.

On considère par ailleurs l'écoulement multiphasique à la brèche comme mono dimensionnel :

$$\vec{u}_e = u_e \cdot \vec{n}$$

le long de S_e , avec \vec{n} la normale sortante à la brèche. La vitesse d'éjection u_e est, dans cette expression, algébrique : u_e peut être positive ou négative en fonction du sens de l'écoulement. Le terme de flux de masse convectée devient alors :

$$\int_{S_e} X \rho Y \vec{u} \cdot \vec{n} dS = u_e \cdot \int_{S_e} X \rho Y dS$$

Le problème consiste alors à calculer la valeur de u_e et de l'intégrale du produit $X\rho Y$ au niveau de la brèche. Les échanges au niveau de cette ouverture peuvent être traduits sous la forme d'un « problème de Riemann » un peu particulier, relatif à la connexion entre un réservoir de dimension infinie (l'extérieur) et un réservoir de volume V (l'intérieur). La résolution complète de ce problème fait l'objet du chapitre II.5.5.

On termine cette section par le calcul du dernier terme de l'équation de conservation de la masse :

Par définition, $\vec{n}_k = \frac{-\vec{\nabla}X_k}{\|\vec{\nabla}X_k\|}$, et comme cela a été explicité au paragraphe III.3.1,

$$\int_V \vec{\nabla}X_k \cdot \vec{n}_k dV = -A_I$$

Alors, $dA_I = -\vec{\nabla}X_k \cdot \vec{n}_k dV$, qui en multipliant chaque membre par \vec{n}_k devient $\vec{n}_k dA_I = -\vec{\nabla}X_k dV$ et

$$\int_V (\rho Y (\vec{u} - \vec{u}_I) + \vec{J}) \cdot \vec{\nabla}X_k dV = - \int_{A_I} (\rho Y (\vec{u} - \vec{u}_I) + \vec{J}) \cdot \vec{n}_k dA_I$$

pour la phase k .

Finalement, l'équation de conservation de la masse de l'espèce i dans la phase k s'écrit, après utilisation de la méthode de sélection de la phase k et intégration sur le volume V , de la manière suivante :

$$\frac{\partial}{\partial t} (V_k \overline{\rho_k Y_{ki}}) + u_e \cdot \int_{Se} X_k \rho_k Y_{ki} dS = - \int_{A_I} (\rho_k Y_{ki} (\vec{u}_k - \vec{u}_I) + \vec{J}_{ki}) \cdot \vec{n}_k dA_I$$

Pour résoudre cette équation, il sera notamment nécessaire d'élaborer des sous-modèles afin de connaître l'évolution des grandeurs d'interface A_I et u_I , ainsi que les autres grandeurs apparaissant dans les intégrales de surface.

Un travail similaire doit être fait sur l'équation de conservation de l'énergie. Il fait l'objet du chapitre suivant.

III.5.2.2 Equation de conservation de l'énergie

On va suivre ici un raisonnement analogue et utiliser à nouveau les propriétés de la fonction de sélection X_k en multipliant l'équation de conservation de l'énergie par cette dernière.

Ainsi, l'équation de conservation

$$\frac{\partial \rho_k E_k}{\partial t} + \text{div}((\rho_k E_k + p_k) \vec{u}_k + \vec{q}_k) = 0$$

devient

$$X_k \cdot \left(\frac{\partial \rho_k E_k}{\partial t} + \text{div}((\rho_k E_k + p_k) \vec{u}_k + \vec{q}_k) \right) = 0$$

Avec

$$X_k \cdot \left(\frac{\partial \rho_k E_k}{\partial t} \right) = \frac{\partial X_k \rho_k E_k}{\partial t} + \rho_k E_k \cdot \vec{u}_I \cdot \vec{\nabla}X_k$$

$$X_k \cdot (\text{div}((\rho_k E_k + P_k)\vec{u}_k + \vec{q}_k)) = \text{div}(X_k [(\rho_k E_k + P_k)\vec{u}_k + \vec{q}_k]) - [(\rho_k E_k + P_k)\vec{u}_k + \vec{q}_k] \cdot \vec{\nabla} X_k$$

L'équation de conservation de l'énergie s'écrit maintenant :

$$\frac{\partial X_k \rho_k E_k}{\partial t} + \text{div}(X_k [(\rho_k E_k + P_k)\vec{u}_k + \vec{q}_k]) = [\rho_k E_k (\vec{u}_k - \vec{u}_l) + P_k \vec{u}_k + \vec{q}_k] \cdot \vec{\nabla} X_k$$

En intégrant cette expression sur le volume V, on calcule les différents termes de l'égalité, en utilisant à nouveau le théorème de Green-Ostrogradsky :

$$\int_V \frac{\partial X_k \rho_k E_k}{\partial t} dV = \frac{\partial}{\partial t} (V_k \overline{\rho_k E_k})$$

$$\int_V \text{div}(X_k [(\rho_k E_k + P_k)\vec{u}_k + \vec{q}_k]) dV = \int_S X_k [(\rho_k E_k + P_k)\vec{u}_k + \vec{q}_k] \cdot \vec{n}_k dS$$

On ne formule ici aucune hypothèse sur l'énergie cinétique ou sur le comportement isobare des phases : on utilise l'énergie totale des phases E_k .

Comme précédemment, on dissocie la surface S du domaine en S_p et S_e pour calculer ce deuxième terme.

a. Traitement de la surface S_p

On obtient

$$\int_{S_p} X_k [(\rho_k E_k + P_k)\vec{u}_k + \vec{q}_k] \cdot \vec{n}_k dS = \int_{S_p} X_k \cdot \vec{q}_{ck} \cdot \vec{n}_k dS$$

le produit scalaire du vecteur vitesse et de la normale à S en tout point étant nul. Le terme de droite traduit le flux de chaleur transmis par la phase k au niveau des parois, supposées non adiabatiques. Ce flux conductif peut être sous certaines conditions considéré comme nul, par exemple si on se focalise sur un intervalle de temps sur lequel les phénomènes de conduction n'ont pas le temps de s'installer. Cela dépend évidemment du matériau constitutif des parois. Lors des expérimentations d'explosion en présence de liquide, les parois de nos enceintes étaient en acier traité. La pénétration de l'information flux sur 20% de l'épaisseur demande un temps de l'ordre de 700 ms (précisé en Annexe B) mais l'énergie absorbée dans ce cas par la masse d'acier est non négligeable par rapport aux énergies initialement présentes

b. Traitement de la surface S_e

A nouveau, l'écoulement à la brèche est supposé mono dimensionnel. Le vecteur vitesse de l'écoulement le long de S_e s'écrit $\vec{u}_e = u_e \cdot \vec{n}$ où u_e est une grandeur algébrique. On néglige ici les transferts diffusifs par rapport aux transferts convectifs. Dès lors, l'intégrale de surface le long de S_e se réduit à :

$$\int_{S_e} X_k [(\rho_k E_k + P_k)\vec{u}_k + \vec{q}_k] \cdot \vec{n}_k dS = u_e \int_{S_e} X_k (\rho_k E_k + P_k) dS$$

Le calcul détaillé de l'intégrale ci-dessus fait l'objet du chapitre III.5.5. Il reste à calculer l'intégrale sur V suivante :

$$\int_V [\rho_k E_k (\bar{u}_k - \bar{u}_I) + P_k \bar{u}_k + \bar{q}_k] \bar{\nabla} X_k dV = - \int_V [\rho_k E_k (\bar{u}_k - \bar{u}_I) + P_k \bar{u}_k + \bar{q}_k] \frac{\bar{\nabla} X_k}{\|\bar{\nabla} X_k\|} \cdot \bar{n}_k dV$$

avec $\bar{n}_k = \frac{-\bar{\nabla} X_k}{\|\bar{\nabla} X_k\|}$ et $dA_I = -\bar{\nabla} X_k \cdot \bar{n}_k \cdot dV$

$$\int_V [\rho_k E_k (\bar{u}_k - \bar{u}_I) + P_k \bar{u}_k + \bar{q}_k] \bar{\nabla} X_k dV = - \int_{A_I} [\rho_k E_k (\bar{u}_k - \bar{u}_I) + P_k \bar{u}_k + \bar{q}_k] \bar{n}_k dA_I$$

\bar{n}_k étant la normale sortante en tout point de A_I . Finalement, l'intégration sur V de l'équation de conservation de l'énergie au sein de la phase k conduit à l'égalité suivante :

$$\frac{\partial}{\partial t} (V_k \overline{\rho_k E_k}) + \int_{Sp} X_k \bar{q}_{ck} \bar{n}_k dS + u_e \int_{Se} X_k (\rho_k E_k + P_k) dS = - \int_{A_I} [\rho_k E_k (\bar{u}_k - \bar{u}_I) + P_k \bar{u}_k + \bar{q}_k] \bar{n}_k dA_I$$

La détermination des intégrales de transfert de masse,

$$- \int_{A_I} (\rho_k Y_{ki} (\bar{u}_k - \bar{u}_I) + \bar{J}_{ki}) \bar{n}_k \cdot dA_I$$

et d'énergie,

$$- \int_{A_I} [\rho_k E_k (\bar{u}_k - \bar{u}_I) + P_k \bar{u}_k + \bar{q}_k] \bar{n}_k \cdot dA_I$$

va être réalisée grâce aux conditions d'interfaces élaborées au chapitre III.3.

III.5.3 Détermination des intégrales de transfert sur A_I

En effet, au chapitre III.3 nous avons établis les relations de saut au travers de l'interface I pour les transferts de masse et d'énergie, en intégrant les équations de conservation sur un volume de contrôle V dont la limite coïncide avec la surface A_I de l'interface.

Il vient alors immédiatement que les intégrales ci-dessus sont égales à :

$$- \int_{A_I} (\rho_k Y_{ki} (\bar{u}_k - \bar{u}_I) + \bar{J}_{ki}) \bar{n}_k \cdot dA_I = -A_I (\dot{m}_k Y_{k,i,I} + \rho_k H_{Mk} (Y_{k,i,I} - Y_{k,i,\infty}))$$

$$- \int_{A_I} [\rho_k E_k (\bar{u}_k - \bar{u}_I) + P_k \bar{u}_k + \bar{q}_k] \bar{n}_k \cdot dA_I = -A_I \left(\dot{m}_k h_k + H_{T_k} (T_I - T_{k,\infty}) + \sum_i \rho_k h_{k,i} H_{Mk} (Y_{k,i,I} - Y_{k,i,\infty}) \right)$$

Pour ces deux équations, les valeurs de $Y_{ki,\infty}$ et $T_{k,\infty}$ sont prises comme étant égales à la moyenne volumique sur V_k de $Y_{k,i}$ et T_k soit les grandeurs $\overline{Y_{ki}}$ et $\overline{T_k}$.

Les intégrales de transfert de masse et d'énergie font appel aux coefficients de transfert de chaleur H_{Tk} et de masse H_{Mk} issus de corrélations basées sur les nombres de Nusselt et de Sherwood respectivement, comme nous l'avons vu à la section III.3.3.

III.5.4 Relations de fermeture du système

On utilise à nouveau ici les relations de fermeture déjà évoquées, c'est-à-dire les relations permettant de déterminer les concentrations à l'interface ainsi que la température T_I .

Ces relations sont comme précédemment issues des conditions d'équilibre :

$$T_{1,I} = T_{2,I} = T_I, \text{ imposée par la solution de l'équation de la chaleur}$$

$$P_{1,I} = P_{2,I} = P \text{ imposée par le caractère isobare du front d'évaporation}$$

$$\mu_{1,I} = \mu_{2,I} \text{ égalité des potentiels chimiques liée à l'hypothèse d'équilibre thermodynamique}$$

Qui ont pour conséquences les relations ci-dessous,

$$P_{g,i,I} = P_{sat}(T_I) \text{ et } Y_{g,i,I} = \frac{M_i}{M_{mel}} \cdot \frac{P_{sat}(T_I)}{P}$$

Ces relations supposent un comportement de type gaz parfait. On oublie ici notre hypothèse stipulant une loi d'état de type « stiffened-gas » pour chaque phase k , seule la compressibilité du gaz étant considérée.

III.5.5 Modélisation des échanges à la surface de fuite du volume V

L'objectif de cette partie est de décrire la méthode choisie pour retranscrire les échanges à la brèche. On rappelle tout d'abord les hypothèses formulées sur les conditions locales d'écoulement afin de caractériser le rejet dynamique au niveau de l'ouverture :

- L'écoulement au niveau de S_e est unidimensionnel.
- Il n'y a pas d'ondes de choc dans le milieu, a minima au niveau de la brèche, ou suffisamment faibles pour être considérées comme isentropiques, ce qui est rapidement réaliste si la charge explosive est située loin de l'ouverture.
- Les phénomènes de diffusion sont négligés par rapport aux mécanismes de convection.

On rappelle également la forme des deux termes que nous cherchons ici à calculer :

$$u_e \cdot \int_{S_e} X_k \rho_k Y_{ki} dS \text{ (par intégration de l'équation de conservation de la masse) et}$$

$u_e \cdot \int_{S_e} X_k \cdot (\rho_k e_k + P_k) dS$ (par intégration de l'équation d'énergie), qui traduisent les échanges entre l'extérieur et le volume de contrôle diphasique.

On formule également l'hypothèse que l'écoulement est quasi-stationnaire au niveau de S_e , durant un pas de temps. Cette hypothèse est analogue à celle qui est effectuée dans le calcul des flux pour le problème de Riemann dans la méthode de Godunov.

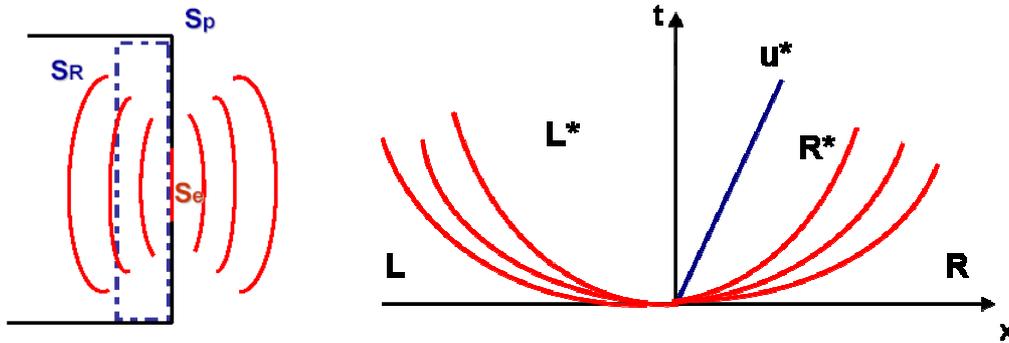


Figure III.23 Représentation schématique du rejet à la brèche via la surface S_e via un problème à deux faisceaux de détente

On choisit de modéliser les échanges à la brèche au travers d'un « problème de Riemann » à une discontinuité de contact et deux faisceaux acoustiques courbés. Ces ondes sont en effet courbées dans le diagramme (x,t) car elles se propagent en 3D à partir de la section S_e . Les domaines extrêmes non perturbés par les ondes sont appelés L (Left) et R (Right).

La zone intermédiaire entre les deux faisceaux est indexée par le symbole (*). La discontinuité de contact entre les deux milieux sépare les domaines L^* et R^* .

On cherche in fine à calculer les valeurs des variables des deux termes ci-dessus dans ces deux domaines, i.e au niveau de S_e . La vitesse de la discontinuité de contact est u^* . L'indice L correspond dans notre problème à l'intérieur de la salle, l'indice R à l'extérieur. Si $u_e = u^* > 0$, alors $P_L > P_R$. Au contraire, si $u^* < 0$, alors $P_L < P_R$. Dans les deux cas, la pression P^* est l'image de P_L ou P_R au travers d'un faisceau de détente. Si $u^* > 0$, $P^* < P_L$, et si $u^* < 0$, $P^* < P_R$. Les ondes qui se propagent sont tridimensionnelles dont on ne connaît pas les invariants de Riemann. Il nous faut tout d'abord identifier les grandeurs physiques invariantes au travers des faisceaux d'ondes.

Pour cela, on construit un volume V définissant une tranche du milieu à proximité de la brèche (figure III.23), délimitée par la surface totale $S = S_e + S_p + S_R$ où S_R est la surface fictive du volume V en dehors des parois et de l'ouverture. Les équations de conservation au sein des phases k vont permettre d'écrire des bilans en masse et énergie sur ce volume V .

Conservation de la masse :

En considérant l'écoulement stationnaire sur le volume de contrôle V proche de S_e , l'équation de conservation de la masse de mélange s'écrit :

$$\text{div}(\rho \vec{u}) = 0$$

Il est considéré implicitement ici que le mélange multiphasique est en équilibre de vitesse au travers de la brèche et animé d'une seule vitesse \vec{u} . En intégrant cette équation sur V ,

$$\int_V \operatorname{div}(\rho \vec{u}) dV = \int_S \rho \vec{u} \cdot \vec{n} dS = 0 \text{ avec } \vec{n} \text{ la normale sortante à } S \text{ en tout point}$$

alors,

$$\begin{aligned} \rho_R \vec{u}_R \vec{n}_R S_R + \rho_e \vec{u}_e \vec{n}_e S_e &= 0 \\ \rho_R u_R S_R &= \rho_e u_e S_e \end{aligned}$$

Le produit $u_R S_R$ est indéfini, car S_R tend vers l'infini alors que u_R tend vers zéro. L'équation de quantité de mouvement ne peut être intégrée car les effets de la pression sur les parois de surface S_p ici sont inaccessibles. Dès lors, on va utiliser l'équation de conservation de l'énergie.

Conservation de l'énergie :

Selon les hypothèses formulées, la conservation de l'énergie sur le volume V se traduit par :

$$\operatorname{div}((\rho_k E_k + P) \vec{u}_k) = 0$$

En intégrant sur V, on en déduit l'égalité suivante :

$$\rho_R \left(E_R + \frac{P_R}{\rho_R} \right) u_R S_R = \rho_e \left(E_e + \frac{P_e}{\rho_e} \right) u_e S_e$$

or, d'après la conservation de la masse

$$\rho_R u_R S_R = \rho_e u_e S_e$$

d'où

$$H_R = H_e$$

avec H l'enthalpie totale de mélange. Il y a conservation de l'enthalpie au travers du faisceau d'ondes acoustiques.

Conservation de la masse de l'espèce i :

De même, en utilisant les équations de conservation de la masse de l'espèce i au sein de la phase k, on démontre en suivant le même raisonnement, qu'il y a conservation des fractions massiques des espèces au travers les ondes,

$$Y_R = Y_e$$

en ne perdant pas de vue ici que les espèces peuvent se présenter sous différentes phases.

Conservation de l'entropie de chaque phase k :

L'équation du mouvement ne pouvant être utilisée, il nous faut une troisième relation de saut. En l'absence d'ondes de choc, et en considérant qu'il n'y a pas d'échanges diffusifs entre phases au niveau de la brèche, il y a également conservation de l'entropie pour chaque phase et on peut écrire suivant l'hypothèse d'écoulement stationnaire à chaque pas de temps :

$$\operatorname{div}(\rho Y_k s_k \vec{u}) = 0$$

En appliquant le même raisonnement que précédemment,

$$\rho_R Y_{k,R} s_{k,R} u_R S_R = \rho_e Y_{k,e} s_{k,e} u_e S_e$$

Finalement, $s_{k,R} = s_{k,e}$, s_k est bien constante au travers les ondes

Condition à la discontinuité de contact :

Au niveau de la discontinuité de contact, il y a égalité des vitesses et des pressions :

$$u_L^* = u_R^* = u^*$$

$$P_L^* = P_R^*$$

Equations d'état et autres éléments utiles:

On pose également : $Y_k = \frac{\alpha_k \cdot \rho_k}{\rho}$, Y étant la fraction massique de la phase k dans le mélange, et

ρ la masse volumique de mélange définie par $\frac{1}{\rho} = \sum_k \frac{Y_k}{\rho_k}$.

L'enthalpie totale H s'écrit $H = e + \frac{P}{\rho} + \frac{1}{2}u^2$ et $e = e_1 Y_1 + e_2 Y_2$ dans le cas diphasique.

$\alpha_1 + \alpha_2 = 1$ constitue de plus la condition de saturation du milieu. L'enthalpie H peut alors s'exprimer sous la forme :

$$H = Y_1 e_1 + Y_2 e_2 + Y_1 \frac{P_1}{\rho_1} + Y_2 \frac{P_2}{\rho_2} + \frac{1}{2}u^2$$

$$H = Y_1 h_1 + Y_2 h_2 + \frac{1}{2}u^2$$

où, par hypothèse, u est la vitesse de l'écoulement commune aux deux phases à proximité de la brèche. On suppose de plus que chaque phase k suit une loi d'état de type stiffened gas :

$$P_k = (\gamma_k - 1)\rho_k e_k - \gamma_k P_{k,\infty}$$

Une telle équation d'état permet de trouver une relation explicite traduisant une transformation isentropique du milieu, et facilite ainsi la résolution du problème de Riemann. L'isentrope associée a pour équation :

$$\frac{P_k + P_{k,\infty}}{\rho_k^{\gamma_k}} = cste$$

où γ_k est le coefficient polytropique de la phase k .

Calcul des variables thermodynamiques au niveau de la brèche :

Le problème étant maintenant posé, on va se servir des relations ci-dessus afin de calculer la valeur prise par u^* , vitesse d'éjection, en fonction des états extrêmes L et R . D'après ce qui précède, on peut tout d'abord écrire à gauche et à droite les invariants pour chaque phase k (notée 1 et 2 ci-dessous) au travers les faisceaux d'ondes :

<p>A gauche,</p> $s_{1L} = s_{1L}^*$ $s_{2L} = s_{2L}^*$ $Y_{1L} = Y_{1L}^*$ $Y_{2L} = Y_{2L}^*$ $H_L = H_L^*$	<p>A droite</p> $s_{1R} = s_{1R}^*$ $s_{2R} = s_{2R}^*$ $Y_{1R} = Y_{1R}^*$ $Y_{2R} = Y_{2R}^*$ $H_R = H_R^*$
--	---

L'équation de l'isentrope permet de remplacer les deux premières équations à gauche et à droite :

$$\frac{P_L + P_{1,\infty}}{\rho_{1L}^{\gamma_1}} = \frac{P_L^* + P_{1,\infty}}{\rho_{1L}^{*\gamma_1}}$$

$$\frac{P_L + P_{2,\infty}}{\rho_{2L}^{\gamma_2}} = \frac{P_L^* + P_{2,\infty}}{\rho_{2L}^{*\gamma_2}}$$

La conservation de l'enthalpie se traduit par

$$\left(Y_1 h_1 + Y_2 h_2 + \frac{1}{2} u^2 \right)_L^* = \left(Y_1 h_1 + Y_2 h_2 + \frac{1}{2} u^2 \right)_L$$

Idem à droite.

De plus, l'enthalpie et la masse volumique de la phase k dans la zone (*) s'écrivent :

$$h_k^* = \frac{\gamma_k}{\gamma_k - 1} \frac{P^* + P_{k,\infty}}{\rho_k^*} \text{ et } \rho_{kL}^* = \rho_{kL} \left(\frac{P^* + P_{k,\infty}}{P_L + P_{k,\infty}} \right)^{1/\gamma_k}$$

Dès lors, le système à considérer se met sous la forme :

$$\left(Y_1 h_1(P) + Y_2 h_2(P) + \frac{1}{2} u^2 \right)_L^* = \left(Y_1 h_1(P) + Y_2 h_2(P) + \frac{1}{2} u^2 \right)_L$$

$$\left(Y_1 h_1(P) + Y_2 h_2(P) + \frac{1}{2} u^2 \right)_R^* = \left(Y_1 h_1(P) + Y_2 h_2(P) + \frac{1}{2} u^2 \right)_R$$

Des deux équations ci-dessus, il est possible de tirer deux expressions de u^{*2} , de par l'égalité de la vitesse u au niveau de la discontinuité de contact :

$$\frac{u^{*2}}{2} = Y_{1L} \left(h_{1L} - h_{1L} \left(\frac{P^* + P_{1,\infty}}{P_L + P_{1,\infty}} \right)^{\frac{\gamma_1-1}{\gamma_1}} \right) + Y_{2L} \left(h_{2L} - h_{2L} \left(\frac{P^* + P_{2,\infty}}{P_L + P_{2,\infty}} \right)^{\frac{\gamma_2-1}{\gamma_2}} \right) + \frac{u_L^2}{2}$$

et

$$\frac{u^{*2}}{2} = Y_{1R} \left(h_{1R} - h_{1R} \left(\frac{P^* + P_{1,\infty}}{P_R + P_{1,\infty}} \right)^{\frac{\gamma_1-1}{\gamma_1}} \right) + Y_{2R} \left(h_{2R} - h_{2R} \left(\frac{P^* + P_{2,\infty}}{P_R + P_{2,\infty}} \right)^{\frac{\gamma_2-1}{\gamma_2}} \right) + \frac{u_R^2}{2}$$

Des deux équations ci-dessus, on peut extraire une formule explicite de P^* , en formulant les hypothèses suivantes :

$P_{1,\infty} \cong 0$, si 1 est un gaz, et $P_{2,\infty} \gg P^*$, si 2 est un liquide. En notant par ailleurs que $u_L \cong 0$ et $u_R \cong 0$, les équations précédentes se simplifient et donnent :

$$u^{*2} = 2 \left[Y_{1L} h_{1L} \left(1 - \left(\frac{P^*}{P_L} \right)^{\frac{\gamma_1-1}{\gamma_1}} \right) \right] \text{ et } u^{*2} = 2 \left[Y_{1R} h_{1R} \left(1 - \left(\frac{P^*}{P_R} \right)^{\frac{\gamma_1-1}{\gamma_1}} \right) \right]$$

Notons que le terme de droite est bien positif, puisque, quel que soit le sens de u^* , $P^* < P_L$ ou P_R .

Posons $\omega = \frac{Y_{1L} h_{1L}}{Y_{1R} h_{1R}}$ et $\Gamma = \frac{\gamma_1 - 1}{\gamma_1}$ alors,

$$1 - \left(\frac{P^*}{P_R}\right)^\Gamma = \omega \left[1 - \left(\frac{P^*}{P_L}\right)^\Gamma \right]$$

ou bien encore,

$$P^* = \left(\frac{1 - \omega}{\frac{1}{P_R^\Gamma} - \frac{\omega}{P_L^\Gamma}} \right)^{\frac{1}{\Gamma}}$$

Finalement,

- si $P_L > P_R$, $u^* > 0$ et sa valeur est précisée par :

$$u^* = \sqrt{2 \left[Y_{1L} h_{1L} \left(1 - \left(\frac{P^*}{P_L}\right)^{\Gamma_1} \right) \right]}$$

- si $P_L < P_R$, $u^* < 0$ et sa valeur est précisée par :

$$u^* = -\sqrt{2 \left[Y_{1L} h_{1L} \left(1 - \left(\frac{P^*}{P_L}\right)^{\Gamma_1} \right) \right]}$$

A noter que $P_L = P$ (dans la salle) et $P_R = 1$ bar si R signifie l'extérieur de dimension infinie. On connaît ainsi à l'état L^* , les valeurs de P^* et u^* . La masse volumique de la phase k, en R^* ou L^* est donnée par l'expression :

$$\rho_{k(L,R)}^* = \rho_{k(L,R)} \left(\frac{P^* + P_{k,\infty}}{P_{(L,R)} + P_{k,\infty}} \right)^{\frac{1}{\gamma_k}}$$

De plus, la fraction volumique de la phase k s'écrit

$$\alpha_{k(L,R)}^* = \frac{\rho_{(L,R)}^* Y_{k(L,R)}^*}{\rho_{k(L,R)}^*} \text{ avec } \frac{1}{\rho_L^*} = \sum_k \frac{Y_{kL}}{\rho_{kL}(P^*)}$$

Enfin, on traduit la conservation des concentrations à travers les ondes par :

$$Y_{k,i})_{L,R} = Y_{k,i})_{L,R}^*$$

Au final, nous sommes capables de calculer les deux termes d'échanges au niveau de la brèche, de l'équation de conservation de la masse et de conservation de l'énergie :

$$u_e \int_{S_e} X_k \rho_k Y_{ki} dS = u^* (\alpha_k \rho_k Y_{ki})^* S_e$$

si on assimile la moyenne sur S_e de X_k à la fraction volumique de la phase k $\int_{S_e} X_k dS = \alpha_k^* S_e$

$$\text{Si } u^* > 0, (\alpha_k \rho_k Y_{ki})^* = (\alpha_k \rho_k Y_{ki})_L^*,$$

$$\text{sinon } (\alpha_k \rho_k Y_{ki})^* = (\alpha_k \rho_k Y_{ki})_R^*$$

De même,

$$u_e \int_{S_e} X_k (\rho_k E_k + P_k) dS = u^* (\alpha_k (\rho_k E_k + P_k))^* S_e$$

$$\text{Si } u^* > 0, (\alpha_k (\rho_k E_k + P_k))^* = (\alpha_k (\rho_k E_k + P_k))_L^*,$$

$$\text{sinon } (\alpha_k (\rho_k E_k + P_k))^* = (\alpha_k (\rho_k E_k + P_k))^*_R$$

On remarque qu'on utilise bien l'énergie totale E. L'hypothèse d'énergie cinétique négligeable ne peut être formulée au niveau de la brèche. De plus, dans la formulation choisie, on garde la possibilité de faire évoluer Se au cours du calcul, ce qui permet par exemple, de considérer un affaiblissement de la structure représentée par le volume V via plusieurs brèches vers l'extérieur ou une surface d'échange croissante.

III.5.6 Récapitulatif

On présente pour finir de manière synthétique notre système d'équations différentielles régissant l'évolution temporelle des phases sur le volume V ainsi que l'ensemble des relations complémentaires nécessaires à la résolution du système :

Equations de conservations de la masse de l'espèce i dans la phase k :

$$\frac{\partial}{\partial t} (V_k \overline{\rho_k Y_{ki}}) + u^* (\alpha_k \rho_k Y_{k,i})^* S_e = -(\dot{m}_k Y_{k,i,I} + \rho_k H_{Mk} (Y_{k,i,I} - Y_{k,i,\infty})) A_I$$

$$\begin{aligned} \text{avec si } u^* > 0, \quad & \alpha_e, \rho_e, Y_e = \alpha_L^*, \rho_L^*, Y_L^* \\ \text{sinon} \quad & \alpha_e, \rho_e, Y_e = \alpha_R^*, \rho_R^*, Y_R^* \end{aligned}$$

Equations de conservation de l'énergie dans la phase k :

$$\frac{\partial}{\partial t} (V_k \overline{\rho_k e_k}) + \int_{S_p} X_k \cdot \vec{q}_{ck} \vec{n}_k dS + u^* (\alpha_k \rho_k H_k)^* S_e = -A_I \left(\dot{m}_k h_k + H_{Tk} (T_I - T_{k,\infty}) + \sum_i \rho_k h_{k,i} H_{Mk} (Y_{k,i,I} - Y_{k,i,\infty}) \right)$$

$$\begin{aligned} \text{avec si } u^* > 0, \quad & \alpha_e, \rho_e, h_e = \alpha_L^*, \rho_L^*, h_L^* \\ \text{sinon} \quad & \alpha_e, \rho_e, h_e = \alpha_R^*, \rho_R^*, h_R^* \end{aligned}$$

Avec $Y_{k,i,\infty} = \overline{Y_{k,i}}$ et $T_{k,\infty} = \overline{T_k}$

Equation d'état et relations thermodynamiques :

Les fluides suivent une loi de type stiffened-gas : $P_k = (\gamma_k - 1) \rho_k e_k - \gamma_k P_{k,\infty}$

Avec $\frac{P_k + P_{k,\infty}}{\rho_k^{\gamma_k}} = \text{cste}$ le long de l'isentrope associée.

L'énergie totale de la phase k s'écrit $E_k = e_k + \frac{1}{2} \vec{u}_k \cdot \vec{u}_k$ et l'enthalpie totale $H = e + \frac{P}{\rho} + \frac{1}{2} u^2$

Les énergies et enthalpies internes s'écrivent $h_k = \sum_i h_{ki} Y_{ki}$ et $e_k = \sum_i Y_{ki} e_{ki}(T_k, P)$

La masse volumique de mélange est donnée par la relation $\frac{1}{\rho} = \sum_k \frac{y_k}{\rho_k}$

Et la fraction massique de la phase k dans le mélange $Y_k = \frac{\alpha_k \cdot \rho_k}{\rho}$ avec $\sum_i Y_{k,i} = 1$.

La condition de saturation s'écrit $\sum_k \alpha_k = 1$

Rappel des conditions d'interface en masse et en énergie :

Les conditions d'interface pour les espèces i s'écrivent:

$$\sum_k (\rho_k Y_{k,i} (\bar{u}_k - \bar{u}_l) + \bar{J}_{k,i}) \bar{n}_k = 0$$

Et se traduisent par

$$\dot{m}_l Y_{l,i} + \rho_{l,i} H_{Ml} (Y_{li,I} - Y_{li,\infty}) + \dot{m}_g Y_{g,i} + \rho_{g,i} H_{Mg} (Y_{gi,I} - Y_{gi,\infty}) = 0$$

Avec H_{Mk} le coefficient de transfert de masse pour la phase k, relié au nombre de Sherwood par

$$Sh_k = \frac{H_{Mk} \cdot \delta}{D_k}$$

La non-accumulation de masse à l'interface conduit à la contrainte : $\dot{m}_l + \dot{m}_g = 0$

La condition d'interface en énergie s'écrit :

$$\sum_k (\rho_k E_k (\bar{u}_k - \bar{u}_l) + P_k \bar{u}_k + \bar{q}_k) \bar{n}_k = 0$$

Et se traduit par

$$\sum_i (h_{li,I} - h_{gi,I}) (\dot{m}_l Y_{li,I} + \rho_{l,i} H_{Ml} (Y_{li,I} - Y_{li,\infty})) + H_{Tl} (T_I - T_{l,\infty}) + H_{Tg} (T_I - T_{g,\infty}) = 0$$

Le coefficient d'échanges thermiques H_{Tg} se déduit de corrélations basées sur le nombre de Nusselt. Le coefficient d'échanges thermiques côté liquide s'exprime en fonction du nombre de Nu par la formule $\frac{Nu_L \cdot \lambda_L}{\delta} = H_{TL}$ en prenant en compte l'étape de chauffage du liquide. Pour une goutte sphérique, ceci correspond à un nombre de Nusselt de 10

Relations de fermeture thermodynamiques à l'interface I :

$T_{1,I} = T_{2,I} = T_I$ imposée par la solution de l'équation de la chaleur

$P_{1,I} = P_{2,I} = P$ imposée par le caractère isobare du front d'évaporation

$\mu_{1,I} = \mu_{2,I}$ égalité des potentiels chimiques liée à l'hypothèse d'équilibre thermodynamique

Ceci se traduit notamment par une relation thermodynamique liant la concentration à l'interface des espèces gazeuses à la pression de saturation associée à la température T_I :

$$P_{g,i,I} = P_{sat}(T_I) \text{ et } Y_{g,i,I} = \frac{M_i}{M_{mel}} \cdot \frac{P_{sat}(T_I)}{P}$$

Flux de masse et d'énergie à la brèche :

Les relations de passage au niveau de la discontinuité de contact, traduisant l'égalité des vitesses

matérielles et des pressions, s'écrivent

$$u_L^* = u_R^* = u^*$$

$$P_L^* = P_R^*$$

La pression P^* est de la forme,

$$P^* = \left(\frac{1 - \omega}{\frac{1}{P_R^\Gamma} - \frac{\omega}{P_L^\Gamma}} \right)^{1/\Gamma} \text{ où } \omega = \frac{Y_{1L} h_{1L}}{Y_{1R} h_{1R}} \text{ et } \Gamma = \frac{\gamma_1 - 1}{\gamma_1},$$

Et la vitesse u^* ,

- si $P_L > P_R$, $u^* > 0$ et vaut $u^* = \sqrt{2 \left[Y_{1L} h_{1L} \left(1 - \left(\frac{P^*}{P_L} \right)^{\Gamma_1} \right) \right]}$
- si $P_L < P_R$, $u^* < 0$ et vaut $u^* = -\sqrt{2 \left[Y_{1L} h_{1L} \left(1 - \left(\frac{P^*}{P_L} \right)^{\Gamma_1} \right) \right]}$

De plus, à l'état L^* ou R^* ,

$$\rho_{k(L,R)}^* = \rho_{k(L,R)} \left(\frac{P^* + P_{k,\infty}}{P_{(L,R)} + P_{k,\infty}} \right)^{1/\gamma_k} \quad \text{et} \quad \alpha_{k(L,R)}^* = \frac{\rho_{(L,R)}^* \cdot Y_{k(L,R)}^*}{\rho_{k(L,R)}^*} \quad \text{avec} \quad \frac{1}{\rho_L^*} = \sum_k \frac{Y_{kL}}{\rho_{kL}^*(P^*)}$$

$Y_{k,i})_{L,R} = Y_{k,i})_{L,R}^*$ par conservation des concentrations au sein de la phase k au travers des ondes acoustiques.

Le modèle ainsi construit doit à la date de rédaction du mémoire être validé par des comparaisons expérience / calcul.

Seul le modèle intermédiaire de l'évaporation d'une goutte d'eau pure dans un gaz à plusieurs espèces a été testé sur un ensemble de cas numériques et démontre une nette capacité à retranscrire finement l'évaporation d'une goutte ou d'un nuage de gouttes sur un large domaine de conditions initiales. L'ensemble du processus est reproduit. Avant d'étudier l'influence des différents paramètres et la justesse des corrélations choisies, c'était l'objectif de cette solution de modélisation.

Les quelques exemples donnés ici montrent que par rapport aux temps caractéristiques de la montée en pression et en température d'un milieu clos suite à une explosion, les différentes phases conduisant à l'évaporation d'un liquide doivent être pris en compte. De la précision de notre approche temporelle découle notre capacité à modéliser de manière fiable l'ensemble du scénario de départ de ce mémoire.

III.6 Bibliographie de la partie III

Publications et documents de référence – Equipe SMASH

- [140] Saurel, R. & Abgrall, R. A multiphase Godunov method for compressible multifluid and multiphase flows. *J. of Comp. Physics*, 150(2), pp 425-467, 1999
- [141] Saurel, R. & Abgrall, R. A simple method for compressible multifluid flows. *SIAM J. on Scientific Computing*, 21(3), pp 1115-1145, 1999
- [142] Saurel, R. & Le Métayer, O. A multiphase model for compressible flows with interfaces, shocks, detonation waves and cavitation. *J. of Fluid Mechanics*, 431, pp 239-271, 2001
- [143] O. Le Métayer, R. Saurel, J. Massoni, Modelling evaporation fronts with reactive Riemann solvers, *Journal of Computational Physics* 205, 567-610, 2005
- [144] O. Le Métayer, J. Massoni and R. Saurel « Élaboration des lois d'état d'un liquide et de sa vapeur pour les modèles d'écoulements diphasiques » *International Journal of Thermal Sciences* Vol. 43(3), March 2004, pp 265-276
- [145] J. Verhaegen, J. Massoni, E. Daniel, R. Saurel. Développement d'Algorithmes Multiphasiques capables de traiter la dispersion d'un mélange multiphasique (liquide/vapeur + particules solides) dans l'air, son évolution lors de l'interaction avec les gaz de détonation d'une charge explosive, ainsi que la réaction de décomposition du mélange résultant avec l'air (décomposition chimique, déflagration ou détonation hétérogène) CCTP n° 2003-022606.DGA/DET/CEG - Rapport Intermédiaire - Décembre 2008 - Rapport 2
- [146] Richard Saurel, Jacques Massoni, Eric Daniel, Olivier Le Métayer, Nicolas Favrie, Fabien Petitpas, Julien Verhaegen et Sergey Gavriluk, Développement d'algorithmes multiphasiques dans le cadre du PEA Averti et intégration dans un code de calcul, *Marché 06 .25.052.00.470.46.51*, Avril 2009

Publications

- [147] D.B. Spalding,, *Convective Mass Transfer*, Edward Arnold Ltd, 1963
- [148] G.A.E Godsave, Studies of the combustion of drops in a fuel spray: the burning of single drops of fuel. In: *Proceedings of the Fourth Symposium (International) on Combustion*. Combustion Institute, Baltimore, MD, 818, 830, 1953
- [149] G.M Faeth, *Evaporation and Combustion of Sprays*, *Progress in Energy and Combustion Science*, Vol. 9, pp 1-76, 1983.
- [150] G.M. Faeth, Fuel droplet burning rates at high pressures, *14th International Symposium on Combustion*, 1972
- [151] B. Abramzon, and W.A. Sirignano, Droplet Vaporization Model for Spray Combustion Calculations, *International Journal of Heat Mass Transfer*, Vol. 32, pp 1605-1618, 1989.
- [152] D.C Kincaid, T.S Longley, A water droplet evaporation and temperature model, *American Society of Agricultural Engineering, Transactions of the ASAE*, vol. 32, 1989
- [153] J.G. Knudsen, and D. L. Katz, *Fluid dynamics and heat transfer*, McGraw-Hill, 1958

- [154] S. Krüger, G. Grünefeld, *Droplet evaporation measurements in a continuous droplet stream inside a wind tunnel*, RWTH Aachen, publication ILASS Europe 2001, 4 – 6 September 2001 à Zürich
- [155] F. Peters, B. Paikert, *Measurement and interpretation of growth and evaporation of mono dispersed droplets in a shock tube*, International Journal of heat and mass transfer, 37, 293 – 302, 1994
- [156] C. Swindal, Measurement of the evaporation rates of closely spaced flowing droplets by optical cavity resonances, Atomization and Sprays, vol.6, N°3, 331-351, 1996
- [157] A. Crespo, A. Linan, *Unsteady effects in droplet evaporation and combustion*, Combustion Science and Technology, vol. 11, n° 1-2, 9 – 18, 1975
- [158] H. Jia, G. Gogos, *Investigation of liquid droplet evaporation in subcritical and supercritical gaseous environments*, Journal of thermo physics and heat transfer, vol. 6, n°4, 738 – 745, 1992
- [159] R.S. Miller, *Evaluation of equilibrium and non – equilibrium evaporation models for many – droplet gas liquid flow simulations*, International Journal of Multiphase flow, 24, 1025 – 1055, 1998
- [160] J.A. Manrique, G.L. Borman, Calculations of steady state droplet vaporization at high ambient pressures, Journal of Heat and Mass Transfer, 12, 1081, 1969
- [161] S. Nesic, J. Vodnik, Kinetics of droplet evaporation, Chemical Engineering Science, vol.46, n°2, 527-537, 1991
- [162] R.L. Matlosz, et al., Investigation of liquid drop evaporation in a high temperature and high pressure environment, International Journal of Heat and Mass Transfer, 15-831, 1972
- [163] H. Y. Nomura, et al., Experimental study on high pressure droplet evaporation using microgravity conditions, International Symposium on Combustion, 26 – 1267, 1996
- [164] I.N. Tang, H.R Munkelwitz, Determination of vapour pressure from droplet evaporation kinetics, Journal of colloid and interface science, vol. 141, n°1, 1991
- [165] P. Béard, Modélisation lagrangienne de la dispersion et de l'évaporation de gouttes dans un écoulement turbulent instationnaire, Thèse de doctorat, Ecole Nationale Supérieure de l'Aéronautique et de l'Espace, Décembre 1994
- [166] G.M. Harpole, Droplet evaporation in high temperature environments, Ph.D. University of California, Los Angeles, 1980
- [167] M. Bouaziz, Etude numérique et expérimentale de l'évaporation simultanée de plusieurs gouttes de carburants – Influence de la pression, de la convection et de l'interaction mécanique, Thèse de doctorat, Université de Perpignan, 1998

Publications de School of Engineering, Faculty of Science and Engineering, The University of Brighton, UK, en collaboration avec Faculty of Physics, Moscow State University, Russia:

- [168] A.P Kryukov et al., Evaporation of diesel fuel droplets : kinetic versus hydrodynamic models, International Journal of heat and mass transfer, 47, 2541 – 2549, 2004
- [169] S. Sazhin et al., Transient heating of diesel fuel droplets, International Journal of heat and mass transfer, 47, 3327-3340, 2004

- [170] B. Abramzon, S. Sazhin, Droplet evaporation model in the presence of thermal radiation, *International Journal of heat and mass transfer*, 48, 1868-1873, 2005
- [171] S. Sazhin et al., Models for droplet transient heating : effects on droplet evaporation, ignition, and break up, *International Journal of thermal sciences*, 2005
- [172] S. Sazhin et al., New approaches to numerical modelling of droplet transient heating and evaporation, *International Journal of heat and mass transfer*, vol. 48, 4215-4228, 2005
- [173] S. Sazhin, Modelling of heating, evaporation and ignition of fuel droplets: combined analytical, asymptotic and numerical analysis, *Journal of Physics : Conference series*, n°22, 174-193, 2005
- [174] S. Sazhin et al., Models for fuel droplet heating and evaporation: comparative analysis, *Fuel*, February, 2006
- [175] S. Sazhin, Multiple scales in spray modelling, *Journal of Physics: Conference Series* n° 55,191-202, 2006
- [176] S. Sazhin, Transient Heating and Evaporation of Fuel Droplets: Recent Results and Unsolved Problems, 5th International Symposium on Multiphase Flow, Heat Mass Transfer and Energy Conversion, July 2005
- [177] S. Sazhin et al., Transient heating of a semitransparent droplet, 4th International Conference on Heat Transfer, Fluid Mechanics and Thermodynamics, Le Caire, Egypt, 2005
- [178] W. A. Abdelghaffar, *Advanced gas droplets heat transfer models and their applications*, 2004
- [179] W. A. Abdelghaffar, *Modelling of Fuel Droplet Heating in Diesel Engines*, PhD, University of Brighton, 2005

Travaux du Mechanical Engineering Department, University of Waterloo, Canada:

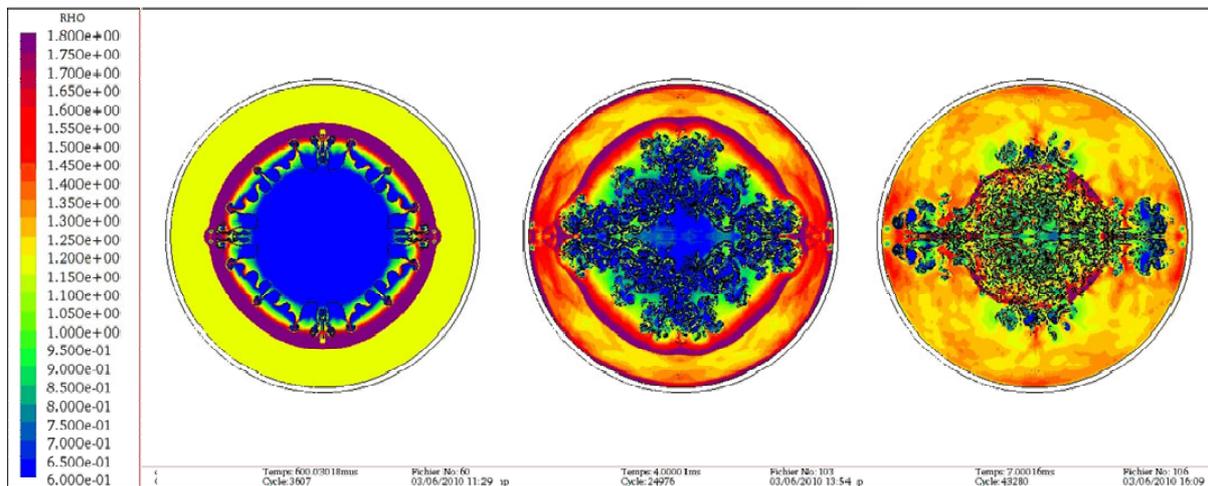
- [180] M. Renksizbulut et al., *Mass transfer correlation for droplet evaporation in high temperature flows*, *Chemical Engineering Science*, vol. 46, n°9, 1991
- [181] M. Renksizbulut et al., Transient droplet evaporation with variable properties and internal circulation at intermediate Reynolds numbers, *International Journal of Multiphase Flow*, vol.14, N°2, 189-202, 1988
- [182] M. Renksizbulut et al., Multi component droplet evaporation at intermediate Reynolds numbers, *International Journal of heat and mass transfer*, vol. 36, n°11, 2827-2835, 1993

Partie IV

Conclusions générales

et

Perspectives



Simulation Ouranos (Lagrange) d'une explosion de HMX dans une chambre sphérique métallique

IV.1 Conclusions générales

Peut-on modéliser de manière fiable les effets collatéraux (en termes de quantité ou concentration de produits éjectés) et les conséquences d'une explosion en milieu clos, et en présence de produits chimiques liquides ? Pour répondre à cette vaste question, qui soulève spontanément de nombreux sous-problèmes, les travaux de thèse se sont déroulés en trois temps :

- une étude qualitative et semi-quantitative du scénario général, afin de comprendre le déroulement chronologique des événements, et d'émettre les hypothèses nécessaires à une modélisation,
- L'étude systématique des effets d'une explosion en milieu clos, en présence ou non de produits liquides. Avant de modéliser la dégradation du produit liquide soumis à une température et à une pression élevées, les expérimentations préliminaires ont en effet fait apparaître la nécessité de quantifier dans le temps et dans l'espace, les effets thermiques et mécaniques d'une explosion à volume constant,
- L'élaboration de modèles OD(t) à partir des conclusions précédentes afin, d'une part, d'estimer la durée de vie d'une phase liquide dans un environnement thermodynamique contraint et, d'autre part, de démontrer la possibilité de modéliser le problème global de manière réduite.

En effet, le terme source d'un tel événement ne peut être modélisé par une libération ponctuelle de produit : il s'agit d'une libération étendue dans le temps, par le biais d'un écoulement chaud a priori diphasique et de débit variable. Les couplages des phénomènes, observés expérimentalement, rendent nécessaires :

- Une modélisation instationnaire de l'évolution de la pression et une estimation du niveau de température atteint dans le volume d'étude, après détonation d'une charge explosive,
- Une modélisation réduite (statistique ou instationnaire) de la libération de la phase liquide dans l'enceinte, sous forme de gouttes millimétriques ou de gouttelettes microniques,
- Une modélisation instationnaire des transferts couplés de masse et d'énergie entre la phase liquide et la phase gazeuse en présence (délai de chauffage, évaporation...) et prise en compte d'éventuelles réactions chimiques à haute pression et haute température (réactions de combustion, dégradation du produit initial...),
- Et enfin, une modélisation instationnaire des rejets à la brèche (débit, température, composition du panache).

L'étude d'une explosion à volume constant a montré qu'il est possible de modéliser de manière simple la montée continue en pression de l'enceinte par une fonction exponentielle croissante, couramment utilisée en science physique pour traduire des vitesses de réaction (en thermochimie et combustion) ou d'autres phénomènes transitoires. Pour une configuration de référence donnée – explosion d'une sphère d'explosif dans un parallélépipède – la valeur maximale de pression est directement proportionnelle au taux de chargement en explosif, sur l'intervalle [0,01 – 0,6] kg/m³.

Le passage à une géométrie différente ou plus complexe demande l'introduction d'un coefficient correctif pour traduire l'amplification – ou l'atténuation – de la combustion turbulente des produits de détonation avec l'air ambiant. En ce qui concerne le champ de température par contre, notre analyse a montré qu'il coexiste des zones chaudes et des zones dites « froides » et que la valeur de température homogène finale calculée à partir d'un code thermochimique ne peut constituer qu'une simple indication. Seule une estimation du volume respectif de ces zones a été proposée ici.

Nous avons établi que les propriétés physico-chimiques des produits stockés sont un point clef du problème (dont les températures et enthalpies caractéristiques) et on suppose ces données connues pour une gamme de produits chimiques liquides à pression ambiante, communément utilisés dans l'industrie. Seul le phénomène d'évaporation a été développé dans ce mémoire en partie III. L'introduction de réactions chimiques entre constituants se traduirait dans les modèles par des termes sources supplémentaires liés à l'apparition ou la disparition d'espèces. Une modélisation fidèle de ce point nécessite toutefois la connaissance de cinétiques complètes de décomposition sous haute pression (jusqu'à 10 bar) et haute température du produit en phase gazeuse et en phase liquide (jusqu'à 1500 K). Pour les produits organophosphorés, ce point est encore à l'heure actuelle non éclairci.

Pour fixer des bornes à notre étude et grâce à l'analyse de nombreuses expériences, nous avons fait le choix d'étudier le comportement d'une phase liquide dispersée dans le volume d'étude sous forme de brouillard (gouttelettes très fines), de gouttes millimétriques ou de nappe liquide. Nous pouvons aussi considérer que le liquide est injecté dans le milieu une fois que la pression quasi-statique est atteinte. L'éjection de liquide suite à la rupture catastrophique d'un conteneur peut toutefois être vu comme un écoulement de type jet pénétrant, à l'image du jet en sortie d'un injecteur diesel, couramment étudié dans le monde de l'automobile. Le jet liquide se fragmente et les gouttes sont freinées de part leurs traînées aérodynamique. Le jet peut alors être découpé en paquets de gouttes de distribution connue et caractérisés par une vitesse initiale et une longueur maximale de pénétration dans la chambre de combustion. Dans notre étude, le liquide éjecté se fragmente sous l'effet de l'écart initial de vitesse puis des sauts au passage des ondes de choc. Ceci peut se traduire dans nos modèles par l'ajout d'équations supplémentaires traduisant la création de gouttes par unité de volume (ou la disparition par coalescence) et basées sur le nombre de Weber We . Par exemple, on peut construire une équation supplémentaire dans notre système portant sur le nombre de gouttes par unité de volume N_p :

$$\frac{\partial N_p}{\partial t} + \frac{\partial N_p u_p}{\partial x} = \dot{N}_p \text{ avec } \dot{N}_p = f(Re, We),$$

Où f est une fonction à déterminer par simulation numérique ou expérimentale. On s'affranchit du terme advectif de cette équation, par le découpage du jet en paquets dont la position et la distribution dépendent de la vitesse et la longueur de pénétration.

Compte tenu de ces hypothèses initiales, et de notre volonté de minimiser in fine la propagation d'erreurs et de sources d'incertitudes le long de notre chaîne de modèles, une modélisation originale des transferts de masse et d'énergie au niveau d'une interface gaz / liquide a été proposée : cette modélisation repose sur la prise en compte des échanges de manière couplée, du côté gaz et du côté liquide, et de l'expression des grandeurs thermodynamiques dans le repère de l'interface I . La signature de l'écoulement se situe au niveau des coefficients d'échanges H , par le biais de nombre sans dimensions, et de l'expression de l'aire interfaciale A_I . Basé sur un modèle diphasique à 7 équations, un jeu d'équations différentielles temporelles permet aisément de mettre

en évidence l'importance du délai de chauffage dans un processus d'évaporation d'un liquide non initialement en conditions de saturation.

La partie III du mémoire se termine par la proposition d'un modèle permettant de retranscrire la transformation du système {explosif+air+liquide} après détonation de la charge, en prenant en compte des échanges convectifs avec l'extérieur au travers d'une surface de faible dimension ($S^{1/2} / V^{1/3} \ll 1$). Le modèle est dit intégro-différentiel : « *intégro* » car il est construit à partir de l'intégration sur un volume de contrôle V des équations régissant les deux phases, « *différentiel* » car le cœur du problème réside dans le couplage temporel des phénomènes. La solution choisie permet également de prendre en compte dès le départ les échanges pariétaux d'énergie (par conduction), la réversibilité de certains processus (débit à la brèche, condensation,...) et laisse plusieurs degrés de liberté dans le choix des phénomènes dominants selon leurs temps caractéristiques, le type de produit stocké et la quantité relative de produits en présence. Le point clef du modèle est la détermination de l'aire A_I en fonction de t . L'expression générale des coefficients de transfert de masse et d'énergie laisse également des perspectives d'amélioration du modèle si ces derniers font l'objet de travaux de recherche spécifiques.

IV.2 Perspectives

En effet, dans le but d'atteindre les objectifs de modélisation du type d'évènement catastrophique ciblé, il est nécessaire d'améliorer d'une part les protocoles expérimentaux et les moyens de mesure associés, et d'autre part de tester les limites ou la robustesse des modèles, afin de ne pas propager tout au long de nos calculs un intervalle d'erreur rédhibitoire.

En ce qui concerne les modèles $0D(t)$, que ce soit pour l'évaporation d'une goutte ou pour le modèle complet d'explosion à volume constant, deux types d'analyse sont programmés :

- La première consiste à réaliser une analyse de sensibilité des différents paramètres sur leurs intervalles de définition respectifs, en appliquant une méthodologie de type plan d'expériences. Ce point demande la réalisation de cas tests avec le modèle construit ;
- La deuxième analyse consiste à réaliser une étude probabiliste, afin de déterminer par exemple un débit probable à la brèche (ou une quantité de liquide éjectée) en faisant varier les différents paramètres, et d'éclaircir (d'introduire) une notion de « pire cas » appliqué à notre problème.

Les effets du rayonnement sur l'évaporation d'un nuage de gouttes n'ont pas été pris en compte dans les solutions de modélisation. Ceci est dû à la complexité du phénomène pour un système de type nuage de gouttes qui, piloté par la diffusion de Mie, diffère notablement du comportement d'une goutte isolée. Dans l'étude de la durée de vie d'une goutte de carburant dans un moteur, la prise en compte du rayonnement est essentielle. Les propriétés optiques de ces liquides sont aujourd'hui bien connues, ce qui n'est pas le cas des produits chimiques liquides que nous devons étudier, en particulier les produits organophosphorés comme le TMP. Des travaux préliminaires sont donc nécessaires afin d'étudier l'absorption et l'émission d'une goutte de TMP soumise à un rayonnement connu.

Dès à présent, on envisage de compléter le système d'équations différentielles en introduisant un terme supplémentaire dans l'équation de l'énergie.

En s'appuyant sur les travaux de Inamura et al. (2007), qui a étudié les effets du rayonnement d'incendie de type Boil Over, on peut modéliser le rayonnement reçu par une goutte semi-transparente par la formule simple :

$$\vec{q}_R = \varepsilon e^{-\varepsilon r} \vec{u}_r \text{ avec } r \text{ la profondeur de pénétration radiale.}$$

Il nous faut également préciser que le code de calcul multiphasique 2D/3D CHYMERE en cours de développement par l'équipe SMASH et le CEA Gramat doit permettre à court terme de simuler un ensemble de cas représentatifs des sous problèmes évoqués dans ce mémoire :

- Fragmentation d'un jet sous choc et fragmentation primaire d'un jet dynamique,
- Evaporation et combustion d'un nuage de gouttes dans leur écoulement,
- Mélange turbulent à une interface gaz lourd / gaz léger réactive,
- Transport dans un écoulement compressible porteur d'un mélange multiphasique,
- etc.

Des simulations numériques paramétriques pourront être utilisées pour compléter / préciser les corrélations et les sous modèles analytiques inhérents à la solution proposée dans ce mémoire. Afin de quantifier ou de limiter des intervalles d'erreur et de dispersion des résultats expérimentaux, plusieurs études et travaux de recherche complémentaires ont d'ores et déjà été entrepris et sont décrits ci-après.

IV.2.1 Calorimétrie de combustion et de détonation

L'acquisition récente d'un calorimètre de détonation (figure IV.1), identique à celui utilisé par Ornellas au Lawrence Livermore National Laboratory, doit nous permettre à court terme de quantifier les énergies de détonation de matériaux énergétiques classiques. Des cellules de confinement massives (or ou platine), seront également utilisées pour simuler, malgré les faibles dimensions des échantillons d'explosif, l'existence d'un état intermédiaire d'explosion à volume constant ou geler la composition des produits de détonation le long de leur isentrope de détente.



Figure IV.1 Calorimètre de détonation du CEA Gramat

IV.2.2 Amélioration des capacités de mesure de température lors d'une explosion

Le second point consiste à lever les doutes en ce qui concerne les niveaux de température atteints lors d'une explosion en milieu clos, et de quantifier les volumes dits « chauds » et « froids » dans l'enceinte hermétique. Comme nous l'avons montré, il n'existe pas à l'heure actuelle de méthode standard afin de mesurer de manière intrusive (et ponctuelle) la température dans un environnement oxydant (et potentiellement corrosif), turbulent, et en présence d'ondes de choc, sur une durée utile de l'ordre de la seconde (pour un temps de montée inférieur à 1 ms). De plus, en présence de produits liquides, ce milieu peut être diphasique avec des éléments de longueur très disparates.

La solution envisagée est le développement d'un *thermomètre à fibre optique, extrinsèque, à contact*, et « multipoints », autrement nommé « pyromètre à contact ». Les termes en italiques désignent une famille de moyens de mesure de T. Le caractère « multipoints » correspond à la nécessité de mesurer T de manière parallèle en de nombreux points du volume d'étude (supérieur à 10). Ce moyen repose sur le principe suivant : un micro corps noir (iridium, platine, alumine, déposés sur une fibre saphir thermiquement stable) utilisé comme transducteur, est placé en bout de fibre. Cette extrémité est logée par exemple dans le plan d'une paroi interne. Le transducteur est interrogé en continu par une source laser dont le signal retour est analysé pour connaître le rayonnement émis par le micro-corps noir. Il s'agit bien d'une mesure par contact, contact entre le corps noir et le fluide à étudier.

A la date de rédaction de ce mémoire, une première étude de faisabilité est lancée, avec pour objectif à moyen terme la réalisation d'un prototype.

IV.2.3 Réalisation d'une chambre sphérique pour l'étude des explosions à volume constant

Comme nous l'avons constaté, les effets de sortie d'une charge explosive lors d'une explosion à volume constant dépendent en partie de la géométrie de l'enceinte, a minima d'une longueur caractéristique du problème. Le taux de chargement en explosif m/V peut être vu comme le ratio d'une longueur l relative à l'explosif et d'une longueur L relative au volume total.

Pour étudier ce point de manière plus précise, et afin de s'affranchir des phénomènes locaux d'extinction de flamme, l'utilisation d'une chambre sphérique s'avèrerait un cas idéal utile et nécessaire. La conception d'un tel moyen expérimental est d'ores et déjà envisagée.

a. Détonation dans une chambre sphérique et atmosphère de travail

La détonation d'une sphère d'explosif dans une chambre sphérique étanche représente un cas idéal qui doit permettre de caractériser de manière plus fine les modes de libération des énergies initialement présentes. Les résultats de l'étude détaillés dans ce mémoire ont amené à cette conclusion. Même si on s'éloigne d'un cas « réel », l'utilisation d'une chambre sphérique aux parois internes lisses permet de minimiser l'influence des facteurs de forme sur le taux de combustion turbulente des produits de détonation. La charge étant placée au centre de la sphère, la dynamique des ondes de choc incidentes et réfléchies est également sphérique.

Il est techniquement envisageable de travailler sous atmosphère contrôlée à l'intérieur d'un tel moyen, en surpression (jusqu'à 30 bars par exemple) ou sous vide partiel. Les gaz de travail sont typiquement l'air, l'oxygène, l'azote ou un gaz neutre de type Argon. L'utilisation de ces gaz permet de limiter les phases anaérobies de combustion par exemple. Une détonation sous azote ou sous gaz neutre permettrait de déterminer l'énergie libérée par la charge en excluant la combustion secondaire des produits de détonation mais en permettant une détente partielle (limitée par le volume de la chambre) des produits de détonation. L'ajout d'un système de récupération et analyse des gaz donnerait accès à des données suffisantes pour lever les doutes en ce qui concerne les résultats des codes thermochimiques, et de s'affranchir des limitations des bibliothèques de réactifs. En effet, couplés aux données issues des expérimentations de calorimétrie de combustion et de calorimétrie de détonation, ces résultats nous permettraient de construire le chemin thermodynamique suivi par les produits gazeux de l'explosion en toute rigueur, alors que nous sommes aujourd'hui obligés de formuler un certain nombre d'hypothèses restrictives. La connaissance du chemin thermodynamique réellement suivi est capitale pour évaluer de manière fiable les effets thermiques de la détonation d'une charge d'explosif secondaire.

De plus, contrôler l'atmosphère initiale signifie s'affranchir des problèmes d'hygrométrie et de variation de température ambiante que nous avons rencontré lors des expériences réalisées en extérieur. La présence d'eau est en effet inévitable malgré toutes les précautions prises pour préparer les enceintes de tir (séchage, ventilation, protection,...).

Ce type de chambre existe et est couramment utilisé pour des expérimentations d'implosion, afin de confiner d'éventuels éclats. La configuration sphérique permet également la mise en place sur une expérience de nombreux moyens de mesure ainsi que la mise en place de moyens d'injection de liquide au cours de l'expérience

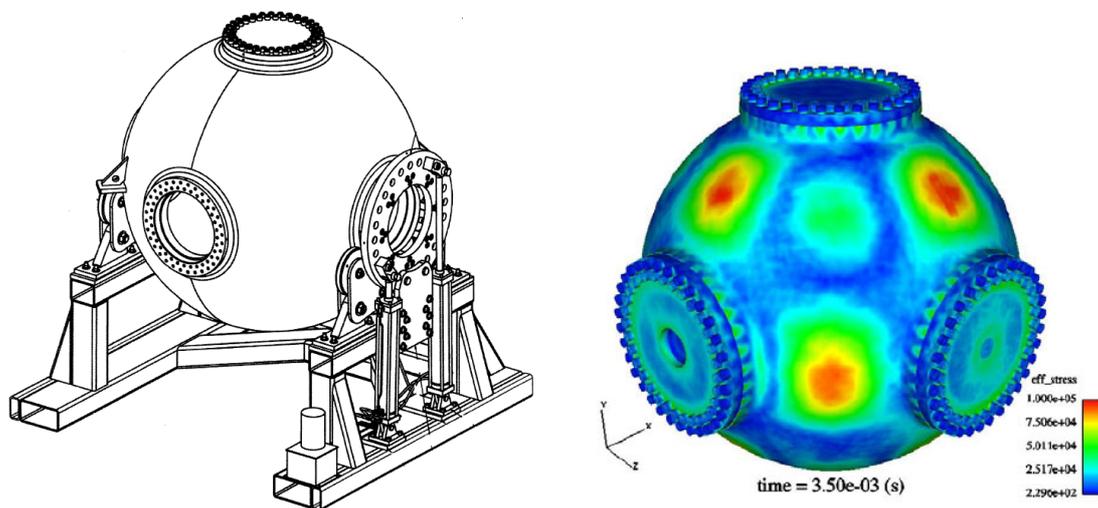


Figure IV.2 Exemple de sphère de confinement d'explosion / implosion – Moyen du Los Alamos National Laboratory, USA

b. Injection d'un liquide pour l'étude d'un milieu diphasique calibré

En effet, au sein des différentes atmosphères de travail évoquées, il est techniquement envisageable d'injecter de manière pilotée un liquide sous forme de gouttes à l'intérieur de la chambre de tir (figure IV.3).

L'utilisation d'injecteurs calibrés permet de connaître la distribution en taille du nuage de gouttes liquides (en régime stationnaire), et la longueur de pénétration du jet. La connaissance de la durée du régime transitoire et du temps de déclenchement permet également de piloter l'intervalle de temps entre la détonation de la charge et l'interaction gaz / liquide.

Ces différentes données sont essentielles à la modélisation, comme nous l'avons vu en parties II et III.

Au-delà des propriétés optiques évoquées plus haut, les données thermochimiques standards caractéristiques d'un produit chimique liquide sont des données essentielles à la modélisation : comme nous l'avons vu, l'introduction de produits tels que le TMP, TEP, ou TBP, utilisés dans l'industrie comme solvants ou comme retardateurs de flamme, induit des effets secondaires de combustion majorants, et une libération potentielle d'acide phosphorique. A l'issue des tirs « bunker », des résidus visqueux couvre les parois du volume d'étude (figure IV.4). Une analyse fine de ces résidus serait pertinente.

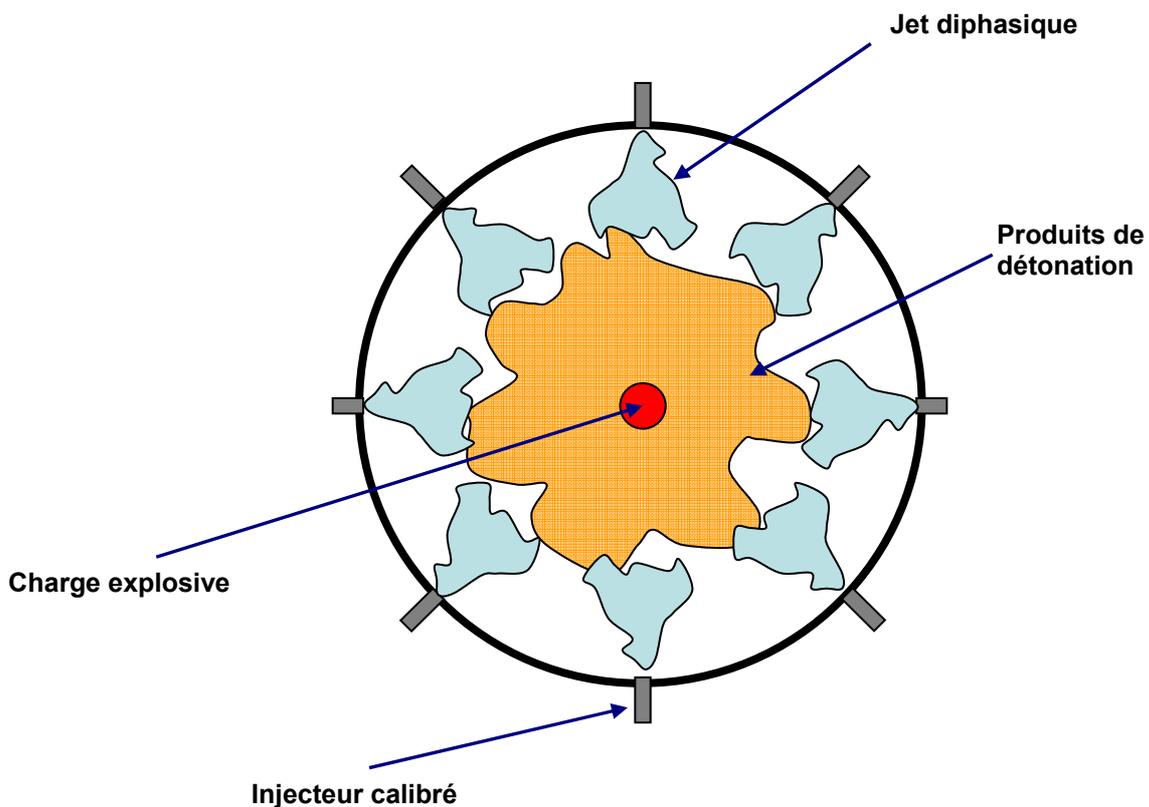


Figure IV.3 Schéma de principe de l'injection en volume de liquide sous forme de spray à l'intérieur de la chambre cylindrique



Figure IV.4 Résidus visqueux à l'issu d'un essai explosif + TMP dans le bunker du CEA Gramat

Un autre axe de progrès naturel est donc de réaliser une analyse qualitative et quantitative du comportement de familles de produits liquides, injectés dans la chambre sphérique. Par exemple, en considérant toujours des produits organophosphorés, au sein de cette famille, les liquides ont des propriétés – tension de surface, viscosité, masse volumique, températures et enthalpie caractéristiques – voisines mais suffisamment différentes afin de tester la sensibilité du protocole expérimental.

c. Moyens de mesures complémentaires envisagés

Outre les moyens détaillés dans ce mémoire (capteurs de surpression thermiquement protégés, enregistrements vidéos) et le moyen de mesure de température déjà mentionné, on envisage de compléter la gamme de grandeur physique directement détectable et mesurable dans le présent contexte :

- On pense tout d'abord à l'utilisation de technologies LASER de type Particle Image Velocimetry afin de caractériser un éventuel rejet diphasique à travers une ouverture calibrée (taille et vitesse de gouttes liquides),
- La configuration sphérique laisse la possibilité d'implanter en paroi une série de détecteurs optiques à faible ouverture (angle solide connu), afin de collecter les flux émis dans le visible (photodiode et fluxmètre à large bande spectrale), dans l'infrarouge ou proche infrarouge (pyromètres 2 et 6 longueurs d'ondes par ailleurs utilisés au CEA Gramat).

Au final, les travaux de recherche décrits dans ces trois parties ont permis de démontrer qu'il est envisageable de traiter de manière adimensionnelle le scénario 3D initial et d'élaborer un modèle de terme source cohérent avec les constatations expérimentales. L'aboutissement des pistes d'amélioration proposées doit permettre de réduire les sources potentielles d'écart. Une fois ce travail réalisé, il sera possible de déterminer le caractère « fiable » de notre modélisation, pour reprendre le vocable de la question initiale.

Pour conclure ce mémoire, il nous faut indiquer que les travaux réalisés, tant expérimentaux que de modélisation, ainsi que les améliorations envisagées peuvent servir à la compréhension de problèmes connexes. On citera par exemple :

- L'atténuation de l'effet de souffle (onde de choc et surpression quasi-statique) par injection contrôlée d'un nuage liquide, à des fins de sécurité (dispositif en zone de stockage d'explosif) ou de protection vis-à-vis d'une agression (optimisation des moyens existants aux Pays Bas ou en Grande Bretagne de protection active de navires),
- La neutralisation de produits chimiques par libération dispersive par explosif d'un autre liquide,
- La modélisation de la surpression quasi-statique engendrée par l'explosion de charges dites à effets renforcés, pour lesquelles l'énergie initialement disponible peut être libérée de façon plus marquée et discriminante lors des phases anaérobies et aérobies. On citera les charges dites fuel-air ou bien encore les charges thermobariques comprenant un fort taux de particules métalliques.

Les solutions de modélisation 0D proposées, en s'inspirant de ce qui a pu être fait dans le monde de l'automobile, ne sont effectivement pas exclusives au scénario initial et laissent certains degrés de liberté à l'utilisateur, moyennant une compréhension suffisante, en termes de temps caractéristiques et de niveaux énergétiques, des sous problèmes physiques du système étudié.

Annexe A Propriétés physiques et thermochimiques des explosifs utilisés

A. Explosifs considérés

On répertorie ici l'ensemble des données utiles à l'étude pour les explosifs suivants :

- HMX (ou Octogène),
- Octoviton (ou V401), explosif comprimé contenant 96 % d'octogène et 4% de viton, en masse,
- TNT (ou Trinitrotoluène, ou Tolite),
- Tritonal, explosif composé de 80 % de TNT et 20 % de poudre d'aluminium, en masse.

a. Formules et propriétés physiques standards

HMX

- **formule brute :** $C_4H_8N_8O_8$
- **masse volumique :** 1900 kg/m^3
- **masse molaire :** 296 g/mol
- **Enthalpie de formation :** 75 kJ/mol

TNT

- **Formule brute :** $C_7H_5N_3O_6$
- **Masse volumique :** 1630 kg/m^3
- **Masse molaire :** 227 g/mol
- **Enthalpie de formation :** -63 kJ/mol

Octoviton 96/4

- **masse volumique :** 1860 kg/m^3
- **masse molaire :** 298 g/mol

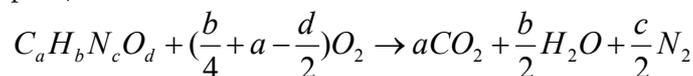
Tritonal 80/20

- **masse volumique :** 1750 kg/m^3
- **masse molaire :** 91 g/mol

b. Balance en oxygène

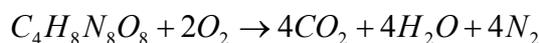
La balance en oxygène (B.O), exprimée en pourcentage, correspond au rapport de masse entre le dioxygène nécessaire à la combustion totale d'un explosif et la masse de celui-ci.

- Pour un explosif secondaire « classique », on peut écrire la réaction équilibrée suivante (réaction de décomposition complète) :



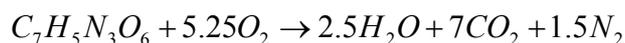
$$\text{Et } B.O = - \frac{m_{O_2}}{m_{C_a H_b N_c O_d}}$$

- Par exemple pour l'octogène de composition $C_4H_8N_8O_8$:



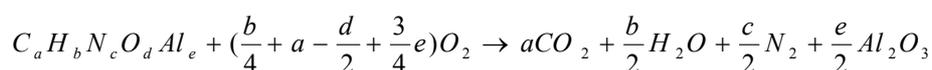
$$\text{et } B.O = - \frac{m_{O_2}}{m_{C_4H_8N_8O_8}} = - \frac{2M_{O_2}}{M_{C_4H_8N_8O_8}} = -0.216 = -21.6\%$$

- Pour la tolite ou TNT de composition $C_7H_5N_3O_6$



$$\text{et } B.O = -\frac{m_{O_2}}{m_{C_7H_5N_3O_6}} = -\frac{5.25M_{O_2}}{M_{C_7H_5N_3O_6}} = -0.740 = -74.0\%$$

NB : Si l'explosif est aluminisé, il convient de faire intervenir l'alumine dans les produits de réaction :



$$\text{Alors, } B.O = -\frac{m_{O_2}}{m_{C_a H_b N_c O_d Al_e}}$$

Lors des expérimentations de détonation en milieu clos, le volume d'air présent est suffisant pour qu'une réaction totale des produits de détonations des explosifs avec le dioxygène soit possible, pour former les produits de réactions pris en compte ci-dessus. Par exemple, envisageons le cas d'une charge de TNT de 145g (avec un booster de 7g d'octoviton) dans la chambre Athéna de 2,356 m³ :

$$m_{O_2(\text{disponible})} = m_{\text{air}(\text{disponible})} \left(\frac{m_{O_2}}{m_{\text{air}}}\right) = \rho_{\text{air}} V_{\text{chambre}} \left(\frac{N_{O_2} M_{O_2}}{N_{O_2} M_{O_2} + N_{N_2} M_{N_2}}\right) = 1.18 \times 2.36 \left(\frac{0.21 \times 32}{0.21 \times 32 + 0.79 \times 28}\right)$$

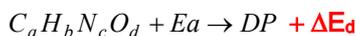
$$\text{Finalement : } \frac{m_{O_2(\text{disponible})}}{m_{O_2(\text{nécessaire})}} = \frac{m_{O_2(\text{disponible})}}{N_{O_2(\text{nécessaire})} M_{O_2}} = \frac{0.6478}{5.25 \times 0.032} = 3.86, \text{ l'oxygène est en excès.}$$

c. Réactions considérées et définitions des énergies associées

Les explosifs secondaires classiques pris en considération dans ce mémoire sont initiés en détonation par l'apport d'une énergie extérieure (mécanique ou thermique) importante. L'utilisation d'amorces constituées de plusieurs étages de matériaux énergétiques permet un apport suffisant pour initier l'onde de détonation que l'on considère suivre, une fois établie dans l'explosif, un modèle classique de type Chapman –Jouguet (CJ).

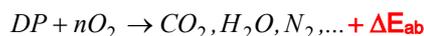
On rappelle ici les principales énergies (exprimées en MJ/kg) rentrant en jeu dans la transformation de l'explosif solide en ces produits finaux après détonation, détente et combustion secondaire, par rapport à un état standard de référence :

- *Energie de détonation ΔE_d (ou « Heat of detonation »)*, qui correspond à l'énergie libérée par la réaction :



où Ea est une énergie suffisante pour initier la détonation de l'explosif solide.

- *Energie de post-combustion des produits de détonation avec l'air ambiant (Afterburning Energy ou Heat of combustion)*, qui correspond à la réaction d'oxydation :



ΔE_{ab} dépend de la composition de DP et des espèces finales considérées.

- *Energie totale de décomposition de l'explosif, sous oxygène, (ou Total Energy release)*, qui correspond à la somme des deux termes préalablement définis :

$$\Delta E_{\text{tot}} = \Delta E_{\text{ab}} + \Delta E_{\text{d}} \text{ en MJ/kg}$$

Le tableau 2 précise ces valeurs pour trois explosifs : TNT, HMX et V401. La figure A2 représente l'importance relative de ces énergies pour ces explosifs.

B. Calcul à l'aide du code CHEETAH des états thermodynamiques des produits de détonation

On utilise ce code afin de déterminer de manière théorique les propriétés balistiques et énergétiques des explosifs secondaires. « Cheetah » est un code thermochimique développé par Lawrence Livermore National Laboratory. La version employée est la version 2.0.

a. Le code thermochimique CHEETAH

Cheetah résout les équations de la thermodynamique entre espèces chimiques pour trouver un état d'équilibre possible, sous des conditions (P, T) demandées, mais aussi, à la place de ces deux variables classiques, sous des conditions sur l'entropie et le volume du mélange par exemple.

L'équilibre thermodynamique est calculé en égalisant les potentiels chimiques μ des espèces en présence, ce qui revient à minimiser l'énergie libre de Gibbs G du système (Cheetah résout le même modèle physique que TIGER, autre code thermochimique plus ancien).

b. Détonation - Etat de Chapman – Jouguet (CJ) et adiabatique de détente associée

Cheetah permet de calculer pour chaque explosif de sa bibliothèque l'état des produits juste en aval du front de détonation selon la théorie de Chapman – Jouguet, cet état se trouvant sur la courbe d'Hugoniot des produits de détonation, le point CJ étant le point de tangence entre l'Hugoniot et la droite de Rayleigh (figure A1).

Ce code permet également de déterminer l'isentrope de détente des produits de détonation à partir du point CJ (en supposant l'expansion adiabatique, sur une durée caractéristique de l'ordre de 10 μs). Le long de l'isentrope, la composition du mélange est constante pour toute température inférieure ou égale à T_{fr} , température dite de gel (on dit que la composition est gelée – Frozen-température en anglais). Cette valeur est fixée de manière arbitraire sous Cheetah, lorsque la composition calculée est cohérente avec les résultats expérimentaux disponibles. Pour le TNT, on estime T_{fr} aux environ de 1800 K .

c. Etat d'explosion à volume constant (CV)

Le calcul de l'état (P, T)_{cv} dit d'explosion à volume constant correspond au cas théorique où une masse d'explosif solide est confinée par une enveloppe lourde, qui résiste au processus de détonation suffisamment longtemps pour que les espèces chimiques atteignent un équilibre thermodynamique (temps caractéristique de l'ordre de la μs). Autrement dit, le confinement de la charge doit subsister le temps d'un aller – retour d'une onde sonique dans le milieu.

Alors que l'état CJ correspond à un pulse transitoire se propageant dans l'explosif, l'état CV est un état stationnaire, qu'il est possible de déterminer analytiquement dans le cas d'une onde de détonation plane ou sphérique (pression du noyau).

d. Réactions (isochore) des produits de détonation (avec l'atmosphère présente)

Cheetah permet également de calculer l'état final d'une réaction de combustion à volume constant (ainsi que l'énergie libérée), entre, par exemple, les produits de détonation d'un explosif, dont on fixe la composition initiale (point de l'isentrope issue de CJ), et l'oxygène présent, en précisant le pourcentage massique de chaque espèce. La même commande permet de calculer les résultats de la combustion complète de l'explosif, sans préciser le régime de décomposition de la phase solide.

De part la méthode utilisée par Cheetah, les résultats de ce calcul de combustion isochore représente un cas idéal, où la combustion est totale, et où le système ne subit aucune perte d'énergie (par déformation mécanique de l'enceinte par exemple). Il est évidemment possible de réaliser ce type de calcul en limitant la quantité d'oxygène présent initialement, ou en incluant d'autres gaz.

e. Exemple de fichier texte « sortie » de Cheetah – calculs des états thermodynamiques pour le TNT

The Composition

Name	% wt.	% mol	% vol.	Heat of formation (cal/mol)	Standard volume (cc/mol)	Standard entropy (cal/K/mol)	Mol. wt.	Formula
tnt	100.00	100.00	100.00	-15057	137.32	0.000	227.13	c7h5n3o6

Heat of formation = -66.293 cal/gm

Standard volume = 0.605 cc/gm

Standard entropy = 0.000 cal/k/gm

Standard energy = -66.307 cal/gm

The elements and percent by mole

c	33.333
h	23.810
n	14.286
o	28.571

The average mol. wt. = 227.134 g/mol

Input>standard run, rho, 1.654000

The hugoniot reference state:

P0 = 1.000000 ATM, V0 = 0.604595 cc/gm, E0 = -66.307497 cal/gm

The C-J condition

The shock velocity = 6.88583e+003 m/s

The particle velocity = 1.71863e+003 m/s

The speed of sound = 5.16721e+003 m/s

P0 = 1 atm, V0 = 0.60459 cc/gm, E0 = -66.30750 cal/gm

Reference state = reactants

H(R) = H--66.29, E(R) = E--66.31, S(R) = S- 0.00

	P (ATM)	V (CC/GM)	T (K)	H(R) (CAL/GM)	E(R) (CAL/GM)	S(R) (CAL/K/GM)	VGS (CC/GM)
1.)	193178.6	0.4537	3711.2	2475.54	352.99	1.590	0.3758

Product concentrations

Name		(mol/kg)	(mol gas/mol explosive)
h2o	Gas	1.096e+001	2.490e+000
n2	Gas	6.603e+000	1.500e+000
co2	Gas	6.282e+000	1.427e+000
co	Gas	2.848e+000	6.468e-001
ch2o2	Gas	1.843e-002	4.187e-003
ch4	Gas	6.650e-003	1.510e-003
c2h4	Gas	2.918e-003	6.629e-004
h2	Gas	2.910e-003	6.610e-004
no	Gas	2.246e-003	5.102e-004
ch3oh	Gas	7.566e-004	1.718e-004
h3n	Gas	5.586e-004	1.269e-004
o2	Gas	1.730e-004	3.929e-005
ch2o	Gas	6.034e-005	1.370e-005
ch3	Gas	1.627e-007	3.695e-008
c2h6	Gas	1.162e-008	2.639e-009
no2	Gas	2.779e-012	6.311e-013
*c	solid	2.166e+001	4.919e+000
Total	Gas	2.673e+001	6.072e+000
Total	Cond.	2.166e+001	4.919e+000

Summary:

Density = 1.6540 g/cc Mixture TMD = 1.6540 g/cc % TMD = 100.0000

The C-J condition:

The pressure	=	19.57 GPa
The volume	=	0.454 cc/g
The density	=	2.204 g/cc
The energy	=	2.44 kJ/cc explosive
The temperature	=	3711 K
The shock velocity	=	6.886 mm/us
The particle velocity	=	1.719 mm/us
The speed of sound	=	5.167 mm/us
Gamma	=	3.007

Freezing occurred at T = 2145.0 K and relative V = 1.652

The mechanical energy of detonation = -7.574 kJ/cc

The thermal energy of detonation = -0.142 kJ/cc

The total energy of detonation = -7.716 kJ/cc

JWL Fit results:

E0	=	-8.031 kJ/cc
A	=	527.28 GPa, B = 6.30 GPa, C = 1.21 GPa
R[1]	=	4.71, R[2] = 1.07, omega = 0.29
RMS fitting error	=	0.64 %

The Constant Volume Explosion condition:

The pressure	=	3.23 GPa
The volume	=	1.000 cc/g
The density	=	1.000 g/cc
The temperature	=	2998 K

Le tableau 1 ci-après récapitule les résultats de ces calculs thermochimiques pour les explosifs retenus :

		TNT	HMX	V401	TRITONAL
Données standards	Masse molaire [g/mol]	227,13	296,168	298,66	91,45
	Heat of formation [kJ/g]	-0,2776	0,2526	/	/
	Masse volumique [kg/m ³]	1654	1905	1902,7	1793
Etat Chapman - Jouguet	Dcj [m/s]	6886	9300	9062	6296
	Pcj [Mbar]	0,193	0,388	0,368	0,179
	Tcj [K]	3711	4113	4025	5374*
	Masse volumique [kg/m ³]	2204	2503	2500	2406
Constant Volume Explosion	Pcv [Mbar]	0,03192	0,04586	0,04605	0,02647
	T [K]	2998	3798	3663	4374*

* calculs avec Al réactif

Tableau A1 Grandeurs et états thermodynamiques des explosifs, calculés avec Cheetah

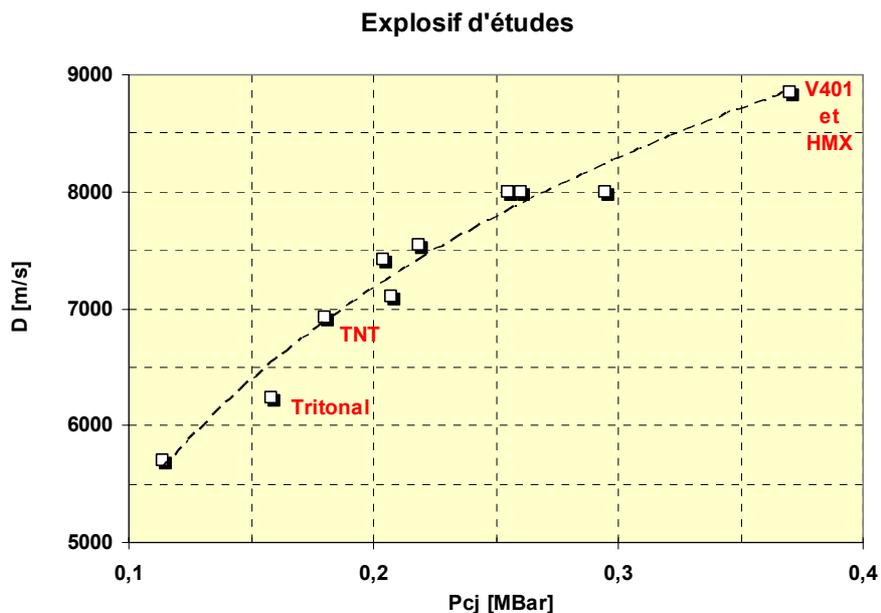


Figure A1 Position des explosifs considérés dans le plan (Pcj, Dcj)

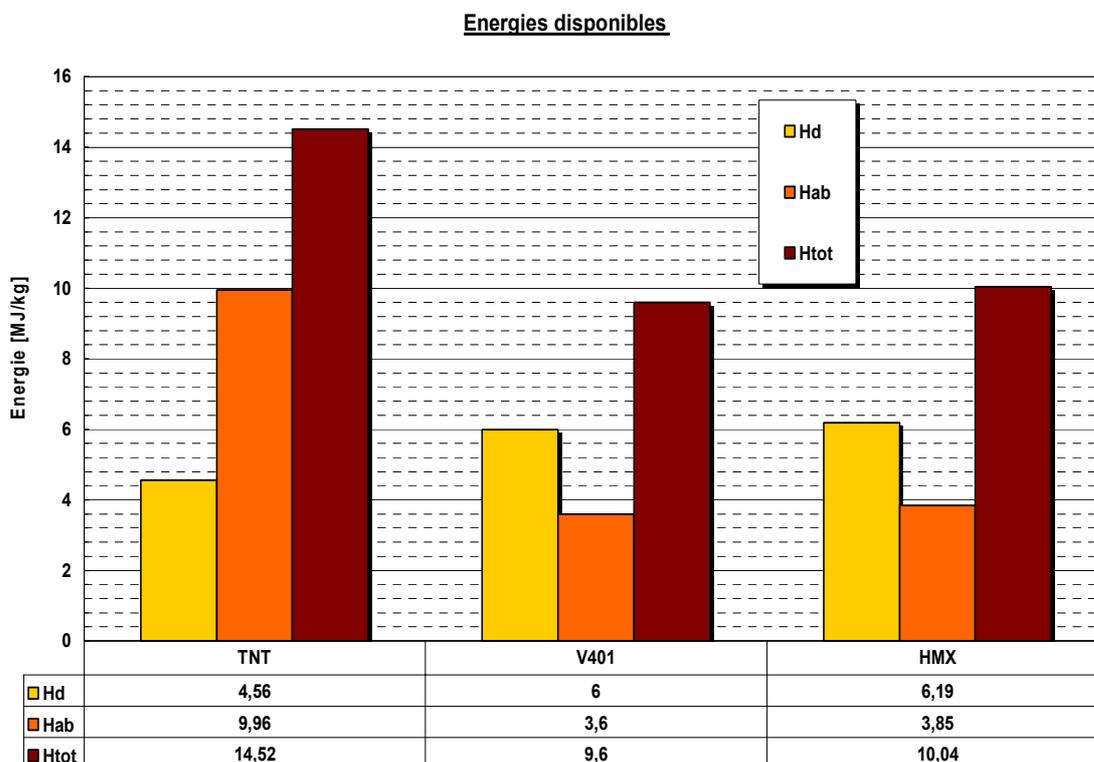


Figure A2 Comparaison des énergies libérées (détonation et combustion secondaire) pour 3 explosifs

E (MJ/Kg)	ΔH_d	ΔH_{ab}	ΔH_{tot}	$\Delta H_{ab}/\Delta H_{tot}$ (%)	$\Delta H_{ab}/\Delta H_d$
TNT	4,56	9,96	14,52	68,6%	2,18
V401	6	3,6	9,6	37,5%	0,60
HMX	6,19	3,85	10,04	38,3%	0,62

Tableau A2 Energies libérées (détonation et combustion secondaire) pour 3 explosifs

C. Equations d'états

a. Des produits de détonation

Les produits de détonation des explosifs peuvent être caractérisés par une équation du type Jones – Wilkins – Lee (ou JWL), le long de leur détente depuis les conditions CJ.

L'équation JWL est du type $P(e, \rho)$. Aux deux variables sont associés, pour la formulation suivante, les 5 paramètres A, B, R1, R2 et ω tels que :

$$P = A \left(1 - \frac{\omega}{R_1 \rho_0 / \rho} \right) e^{-R_1 \rho_0 / \rho} + B \left(1 - \frac{\omega}{R_2 \rho_0 / \rho} \right) e^{-R_2 \rho_0 / \rho} + \frac{\omega \rho_0 e}{\rho_0 / \rho}$$

Cette équation JWL, déterminée à l'aide de codes thermochimiques comme *Cheetah* et/ou expérimentalement par le biais du « test du cylindre » standardisé, traduit fidèlement la détente isentropique anaérobie des gaz pour les faibles taux d'expansion. Pour le TNT par exemple, le jeu de paramètres est le suivant :

$$A = 3,712 \text{ Mbar} ; B = 0,0323 \text{ Mbar} ; R_1 = 4,15 ; R_2 = 0,95 ; \text{ et } \omega = 0,3$$

A l'état CJ, le coefficient polytropique Γ peut être pris en première approximation comme étant égal à 3.

Après détente et combustion secondaire des « prodets », l'état des gaz en présence peut être correctement modélisé par une loi de type *gaz parfait* (GP). Typiquement, la phase gazeuse peut se trouver sous une pression de 1 à 10 bars, et une température moyenne de l'ordre de 1000 K. Le coefficient poly tropique γ est, sous ces dernières conditions, pris égal à 1,4. Ce coefficient varie en effet peu, sous faible pression et pour des températures inférieures à 2000 K, comme le montrent les figures ci-dessous (pour l'air, en prenant en considération les phénomènes de dissociation/ionisation).

b. Autre équation utilisée

Plus généralement, dans les travaux de modélisation multiphasique développés dans ce mémoire, les phases en présence dans le volume d'étude sont décrites par une équation de type *Stiffened Gas* :

$$P = (\gamma - 1)\rho e - \gamma P_\infty$$

Cette équation est également du type $P(e, \rho)$. On choisit ce type d'équation afin de fermer proprement un système d'équations multiphasiques. Elle permet en effet de garantir une homogénéité de présentation et de faciliter la résolution du système, et retranscrit de manière robuste le comportement physique des phases en présence sur les domaines thermodynamiques explorés.

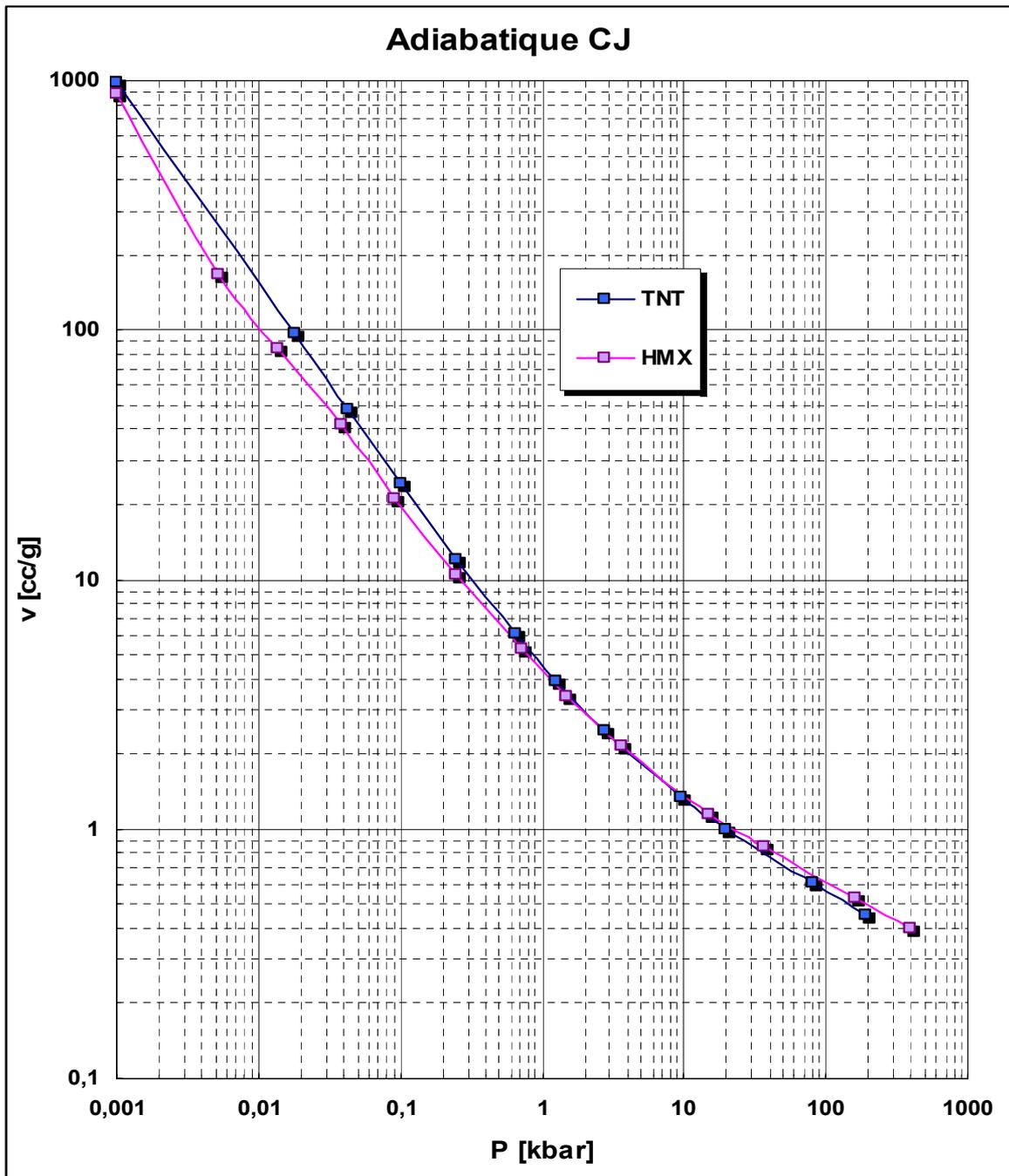


Figure A3 Détente Adiabatique des explosifs TNT et HMX représentées dans le plan (P,v)

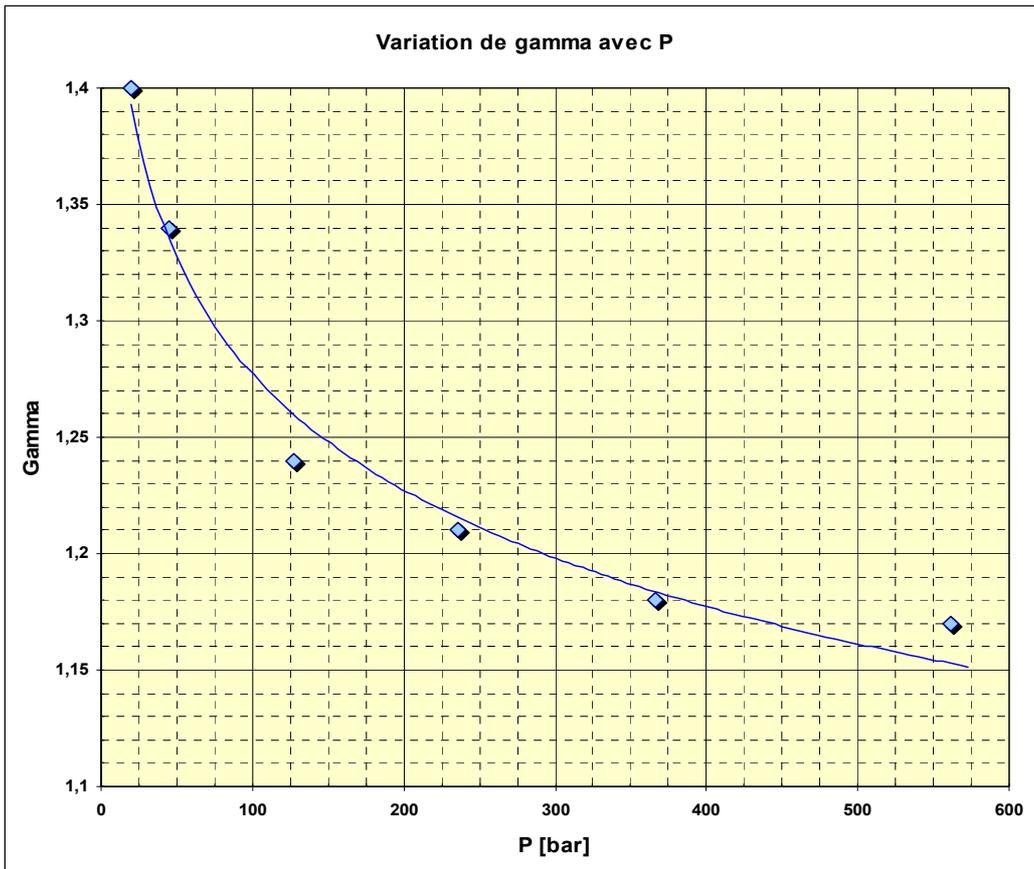


Figure A4 Variation de γ en fonction de la pression

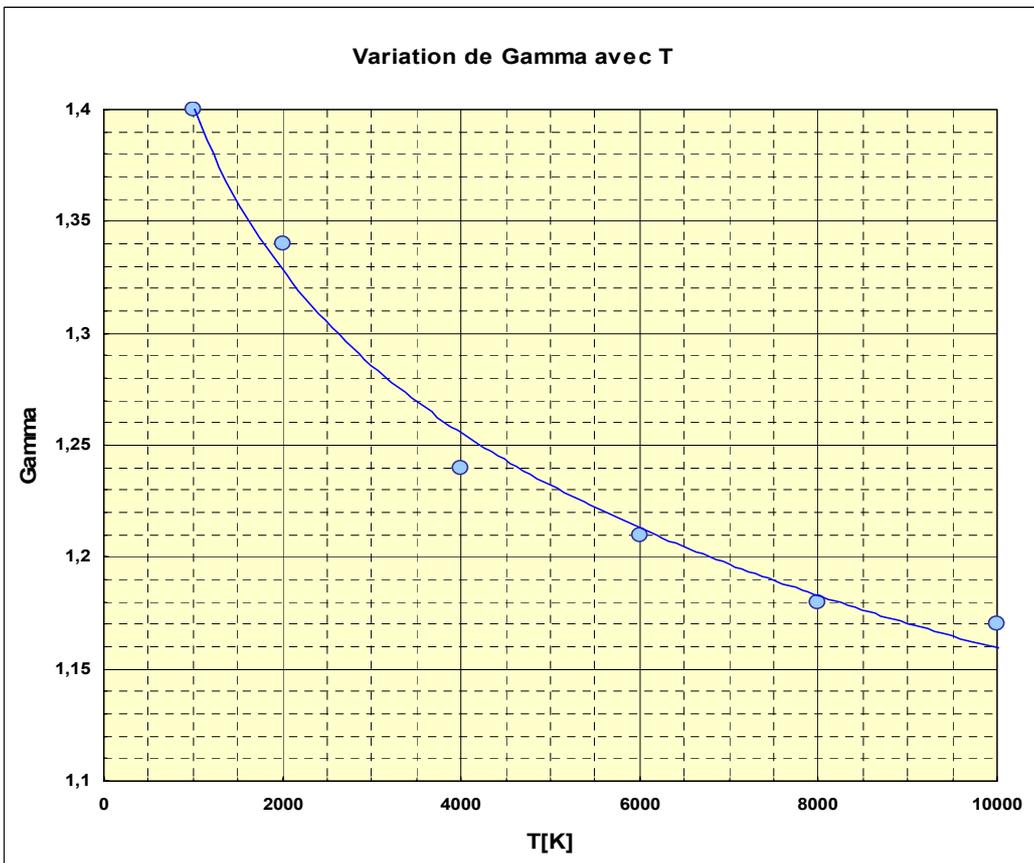


Figure A5 Variation de γ en fonction de la température

D. Expérimentations de calorimétrie de combustion

La combustion en bombe calorimétrique est un moyen classiquement utilisé pour déterminer l'enthalpie de combustion (à volume constant) de divers composés, y compris les matériaux énergétiques à fort pouvoir calorifique tel que les explosifs secondaires (figure A6).

L'explosif, mis sous forme de poudre, est placé dans un creuset, lui-même installé dans une bombe hermétique en acier capable de résister à de fortes pressions.

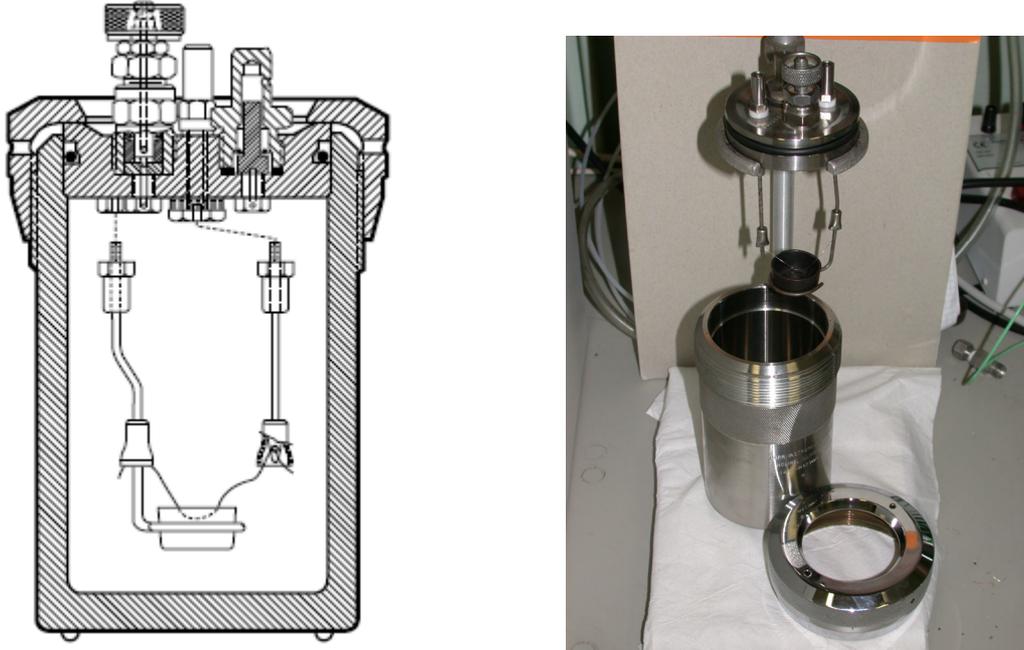


Figure A6 Gauche : vue en coupe du calorimètre de combustion – droite : vue générale de la bombe et aperçu du creuset

L'explosif est initié en combustion par un fil chaud. La combustion se déroule à volume constant, sous atmosphère contrôlée, typiquement 30 bars d'oxygène pur ou tout autre gaz inerte : azote, argon, etc. avec une pression comprise entre 10 et 30 bars. La masse initiale d'explosif est de l'ordre de 0,5 g. Deux types de mesure peuvent être effectués en parallèle :

Une mesure classique dite de calorimétrie : la bombe est immergée dans un bain d'eau dont la masse est calibrée. L'élévation de température de cette masse d'eau induite par la chaleur transmise au travers des parois de la bombe permet de connaître l'enthalpie massique de combustion du produit testé. Il s'agit d'une mesure indirecte qui permet de connaître l'état final de la réaction de combustion en termes d'énergie libérée (en cal/g ou kJ/g).

Une mesure de la surpression interne générée par la combustion de l'explosif, et donc de la surpression quasi-statique engendrée par la combustion totale des réactifs (l'oxygène étant en excès).

Au CEA Gramat, on utilise un calorimètre Parr ® 1108 Oxygen Bomb, dédié à l'étude des composés énergétiques de type poudre, propergols et explosifs. La bombe est instrumentée par un capteur piézo-résistif Kistler. La constante de temps de la chaîne de mesure est supérieure à 1 minute, pour une fréquence d'échantillonnage de 100 kHz.

Annexe B - Expérimentations de détonation en milieu clos (DMC)

Cette annexe présente de manière détaillée les protocoles expérimentaux dits « DMC » mis en œuvre au CEA Gramat pour caractériser les effets de la détonation d'une charge d'explosif secondaire de type $C_xH_yN_zO_p$ (avec ou sans aluminium) dans un milieu clos ou partiellement ouvert (dimensions de la surface de fuite très inférieures à une longueur caractéristique du problème).

Plusieurs types d'expérimentations ont été réalisés : si les moyens de mesure sont communs, chaque type se différencie notamment par le volume et la forme de l'installation, sa résistance aux contraintes mécaniques et donc par la masse d'explosif maximale admissible.

A. Objectifs des expérimentations et philosophie de la démarche

L'objectif de ce type d'expérimentations est de caractériser les variations temporelles des champs de pression et de température à l'intérieur du volume d'étude, suite à la détonation de la charge, et de quantifier l'influence de la présence initiale de produits liquides sur l'évolution du système.

Les phénomènes observables ou mesurables attendus sont décrits en détails dans la partie II du mémoire. On précise à nouveau ici la philosophie générale des expérimentations : compte tenu des moyens existants aujourd'hui, les systèmes de mesures permettent de caractériser l'évolution globale du système étudié, et parallèlement aux efforts de modélisation, de « réduire » l'évolution de phénomènes 3D complexes à des grandeurs exploitables telles que la pression quasi-statique au sein du volume V . Dans cette même optique, l'information accessible par une analyse spectrale des signaux analogiques ou numériques est essentielle et riche d'enseignements.

B. Protocoles expérimentaux

B.1 Principe général

Les expérimentations DMC consistent comme leur nom l'indique à faire détoner en milieu clos ou partiellement ouvert une masse m d'explosif secondaire (HE) dont les produits de détonation sont sous-oxygénés. Leur balance en oxygène (B.O) dépend de la composition initiale de l'explosif. Le volume d'air V initialement disponible est assez grand pour que l'oxygène présent soit en excès et que l'ensemble des produits de détonation soit oxydé à la fin du processus de combustion secondaire. On définit le taux de chargement du système $\{V_{\text{air}} + \text{HE}\}$ comme étant le rapport m/V en kg/m^3 .

B.1.1 Charges explosives et amorçage

Plusieurs types et masses d'explosifs ont été testés afin de faire varier la B.O d'une part, la durée et l'amplitude du processus de combustion secondaire d'autre part. Les taux de chargement varient entre 0,025 et 0,1 kg/m^3 (voir Partie II). Les charges sont, pour tous les types d'expérimentations décrits ci-après, soit cylindrique soit sphérique. Pour les explosifs à fort diamètre critique, un booster en octoviton (96% HMX et 4% viton) placé au cœur de la charge permet d'initier de manière certaine l'explosif en détonation. La présence ou non d'un booster, ainsi que ses dimensions, est précisée dans les tableaux récapitulatifs au chapitre C.

Lors de chaque tir (sauf mention spéciale, § B.2.3), l'explosif est amorcé par une amorce à fil explosé de type RISI RP80 qui contient 120 milligrammes d'hexogène et 80 mg de pentrite. Cette quantité d'explosif est prise en compte dans les différents calculs thermochimiques ou analyses des résultats.

On rappelle que les explosifs utilisés sont, dans le cadre de cette étude (voir annexe A) l'octoviton et le TNT.

B.1.2 Expérimentations de type 1 – Explosif seul

Le premier type d'expérimentation consiste à faire détoner une charge explosive nue, seule, à l'intérieur d'une chambre de tir métallique, conçue pour résister aux effets mécaniques dynamiques et statiques de l'explosion. La charge est placée, selon les possibilités de fixation offertes par le volume d'étude, au centre de la pièce ou surélevée par rapport au plancher (figure B4).

B.1.3 Expérimentations de type 2 – Explosif + Liquide

Le deuxième type d'expérimentation consiste à faire détoner une charge explosive similaire à celles utilisés pour le type 1 en présence d'un produit liquide initialement réparti dans la chambre, selon deux possibilités :

- Le liquide est réparti sous forme de flaque au niveau du plancher de la chambre de détonation, sur toute ou partie de la surface disponible à l'aide de bacs de rétention et/ou de zones de stockage prédéfinies (figures B4 et B7). L'épaisseur de la flaque est alors de l'ordre de 1 cm.
- La charge explosive est immergée dans le liquide (expérimentations dites de « pire cas » ou cas limite).

Le liquide utilisé est de l'eau.

B.1.4 Expérimentations de type 3 – Scénario « Bunker »

Enfin, le troisième type consiste à simuler expérimentalement l'ensemble de la chaîne d'évènements objets de l'étude en faisant détoner une charge cylindrique à éclats en présence de TMP ou d'eau. Le liquide est conditionné dans des containers en plastiques de volume unitaire égal à 0,5 litre (au nombre de 5), aléatoirement répartis dans la chambre ou alignés le long d'une paroi (figure B1).



Figure B 1 A gauche, Vue interne du bunker – charge à éclats entourée de containers, à droite, containers alignés le long d'une paroi

B.2 Chambres de détonation et dispositions des moyens de mesure

Afin de couvrir un large spectre de configurations à échelle réduite (masse de HE, masse initiale de dioxygène, forme, positions des renforts, etc.), trois chambres ont été utilisées et sont présentées ci-après. Outre le volume utile, la forme de la chambre (cylindrique d'allongement L/D, parallélépipédique) joue un rôle sur la qualité du mélange turbulent des produits de détonation avec l'oxygène (réverbération des ondes de choc).

B.2.1 Chambre parallélépipédique « Bunker »

Cette chambre en acier inoxydable conçue pour ces expérimentations a un volume intérieur de 1,875 m³, pour des dimensions L x l x h, respectivement de 2,5 x 1,25 x 0,6 m³. Les parois ont une épaisseur de 5 cm. Les renforts extérieurs permettent de faire détoner jusqu'à 500 grammes de TNT. La charge explosive est disposée au centre du plancher à une hauteur variable (de l'ordre de 15 cm) selon l'expérimentation. La ligne de mise de feu est mise en place grâce à une ouverture pratiquée au travers du toit du bunker.



Figure B 2 Gauche : Vue extérieure du bunker et hublots latéraux – Droite : Vue arrière du bunker

Cette chambre en acier inoxydable conçue pour ces expérimentations a un volume intérieur de $1,875 \text{ m}^3$, pour des dimensions $L \times l \times h$, respectivement de $2,5 \times 1,25 \times 0,6 \text{ m}^3$. Les parois ont une épaisseur de 5 cm. Les renforts extérieurs permettent de faire détoner jusqu'à 500 grammes de TNT. La charge explosive est disposée au centre du plancher à une hauteur variable (de l'ordre de 15 cm) selon l'expérimentation. La ligne de mise de feu est mise en place grâce à une ouverture pratiquée au travers du toit du bunker. Le « bunker » dispose de 5 hublots de visualisation et/ou de manutention (pour mise en place de l'édifice pyrotechnique). Des hublots en verre blindé autorisent l'enregistrement continu par caméras ultra-rapides des événements internes au bunker lors de l'expérimentation (§ B.5).



Figure B3 Gauche : Hublot supérieur pour visualisation et ouverture calibrée – Droite : points de mesure de surpression interne et système de fixation des capteurs

Une ouverture calibrée et obstruable est pratiquée sur le toit afin de pouvoir réaliser des expérimentations en milieu totalement confiné ou partiellement ouvert sur l'extérieur (surface de fuite faible connue). La chambre dispose également de trois points de mesure en surpression dynamique ou quasi-statique (§ B.3). Les capteurs sont montés sur une paroi latérale du bunker et réalisent une mesure de pression dite réfléchie. Ils sont isolés mécaniquement du reste de la structure par un système d'adaptation d'impédance défini pour cette expérimentation.



Figure B4 Gauche : dispositif de rétention de 15 litres d'eau (création d'une flaqué partielle) – Droite : charge sphérique de TNT de 150 g et mise en place de la ligne de mise de feu.

De plus, deux points de mesure de température par thermocouple sont également prévus au niveau du plafond de la chambre (figure B5).

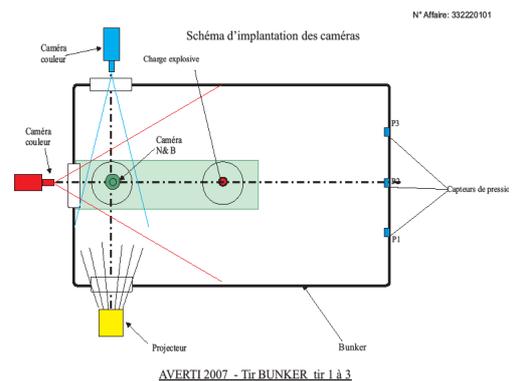
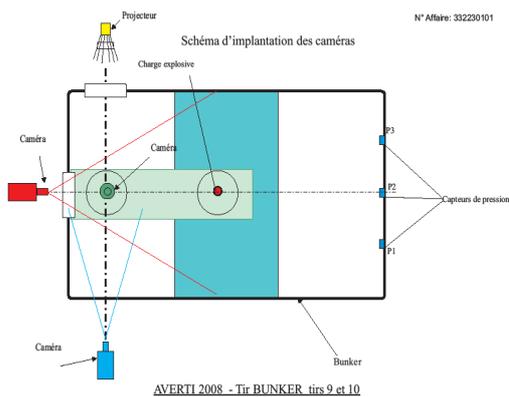
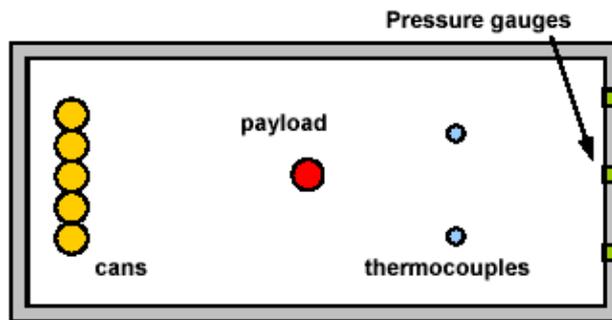


Figure B 5 Schéma d'une expérimentation « bunker » - haut : implantation des mesures de P et T - bas : mise en place des moyens de visualisation (vues de face, latérale et supérieure) et d'éclairage

B.2.2 Chambre cylindrique « Athéna »

La deuxième enceinte utilisée est de forme cylindrique, de volume intérieur égal à 2,356 m³. Cette chambre a des parois en acier d'épaisseur moyenne de l'ordre de 5 cm, protégées à l'intérieur comme à l'extérieur par une peinture spécifique. Le diamètre intérieur moyen est de 0,995 m, pour une longueur utile de 3,01 m. La paroi cylindrique est mécaniquement renforcée par des arceaux soudés sur la face interne (figure B7).



Figure B 6 Vues extérieures de la chambre Athéna : à gauche : tapes de fermeture – à droite : hublots amovibles et prises d'air pour passage de la ligne de mise de feu.

La chambre dispose d'un plan de travail amovible : la charge explosive est placée au centre de la chambre à l'aide d'un support adapté (figure B7). Un bac disposé sur le plan de travail permet de simuler la présence d'une flaque de liquide (figure B7).



Figure B 7 Vues intérieures chambre Athéna - gauche : mise en place d'une charge sphérique – droite : bac de rétention simulant une flaque de liquide / plancher de travail

Lors de la détonation d'une charge explosive, la configuration intérieure de la chambre renforce, par des réverbérations multiples, le mélange turbulent de produits de détonation avec l'atmosphère ambiante. Plusieurs ouvertures (hublots latéraux ou prise d'air sur la partie supérieure de la chambre) permettent de modifier les surfaces de fuite ou de rendre l'enceinte totalement hermétique. Deux montages mécaniques disposés sur les tapes de fermeture en bout de cylindre sont utilisées pour monter des capteurs de pression pariétaux (mesure de pression réfléchiée sur une surface plane). A nouveau, il est possible d'instrumenter le volume d'étude en thermocouples grâce à des prises adaptées au travers de la paroi de la chambre.



Figure B9 Implantation d'un capteur de pression sur une tpe de fermeture de la chambre Athéna

Le schéma B10 est un exemple de disposition initiale et précise les cotes principales du problème (altitude de la charge explosive par rapport au plancher, axe de mesure de P, ...). La méthode d'amorçage de la charge est similaire à celle utilisée lors des tirs « bunker ».

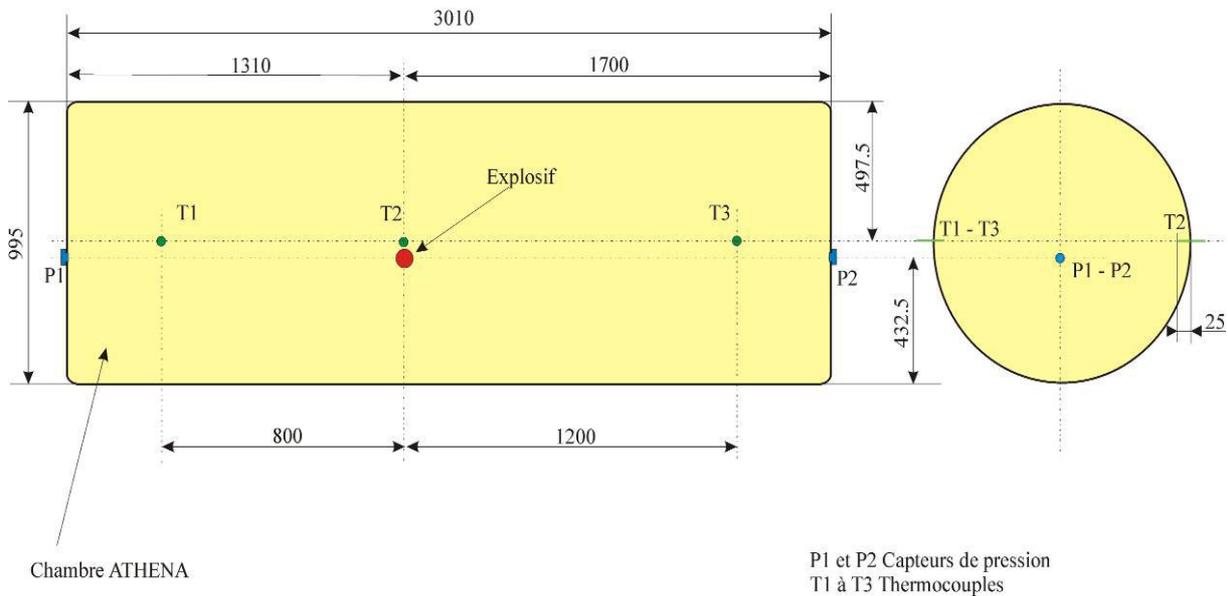


Figure B10 – Schéma d'implantation des capteurs de P et T dans la chambre Athéna et dimensions caractéristiques

B.2.3 Chambre cylindrique « Sirocco »

La troisième enceinte de tir, ou chambre « Sirocco » est en acier de forme cylindrique. La paroi latérale est lisse à l'intérieur et à une épaisseur de 1 cm. Le cylindre est fermé par deux portes en acier d'épaisseur 5 cm à chaque extrémité. A nouveau, les deux portes sont instrumentées en capteurs de surpression. La chambre dispose également de trois points de mesure de pression au niveau de la paroi cylindrique (partie centrale de la chambre).



Figure B11 Vues extérieures de la chambre Sirocco 33 m³ – Mise en place des tapes de fermeture

Les dimensions intérieures de la chambre sont une longueur de 6,8 mètres pour un diamètre de 1 m, soit un volume utile de 33 m³. La charge explosive est suspendue au centre du volume comme le montre la figure B12.

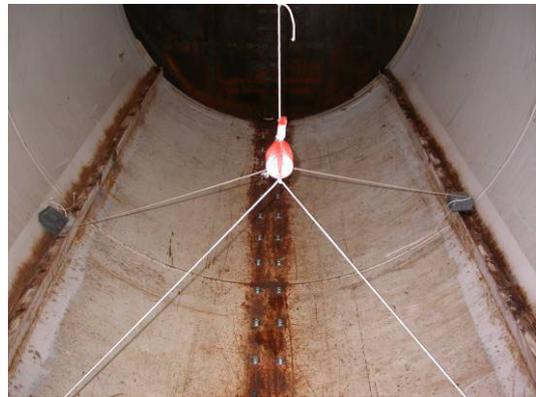


Figure B12 Gauche : tpe de fermeture et capteur de pression pariétal – droite : mise en place d'une charge cylindrique au centre de la chambre

Pour des raisons de sécurité pyrotechnique liées à la durée de manipulation des portes de fermeture de la chambre, l'explosif est ici amorcé en détonation à l'aide d'un cordeau détonant chargé en pentrite, lui-même amorcé à l'extérieur de l'enceinte. Une longueur d'environ un mètre de cordeau se trouve initialement à l'intérieur de la chambre. L'énergie apportée par la pentrite est prise en compte dans l'interprétation des résultats de surpression interne. L'utilisation d'un tel système d'amorçage ne permet pas de garantir une parfaite étanchéité de la chambre de détonation.



Figure B13 Système d'amorçage de la charge explosive par cordeau détonant – gauche : partie de raccordement finale – droite : passage du cordeau à travers la paroi de la chambre

B.3 Capteurs de surpression interne

Suite à l'explosion de la charge, la pression interne augmente globalement et subit de fortes variations, sous l'action des trois composantes : ondes de choc (et rebonds), production de gaz par la détonation, libération d'énergie par combustion secondaire des produits de détonation (partie II).

Quel que soit le volume de travail et la forme initiale de la charge et quel que soit le point de mesure pariétal, les signaux de pression ont la forme générique suivante, à des échelles de temps de respectivement 100 ms et 10 s :

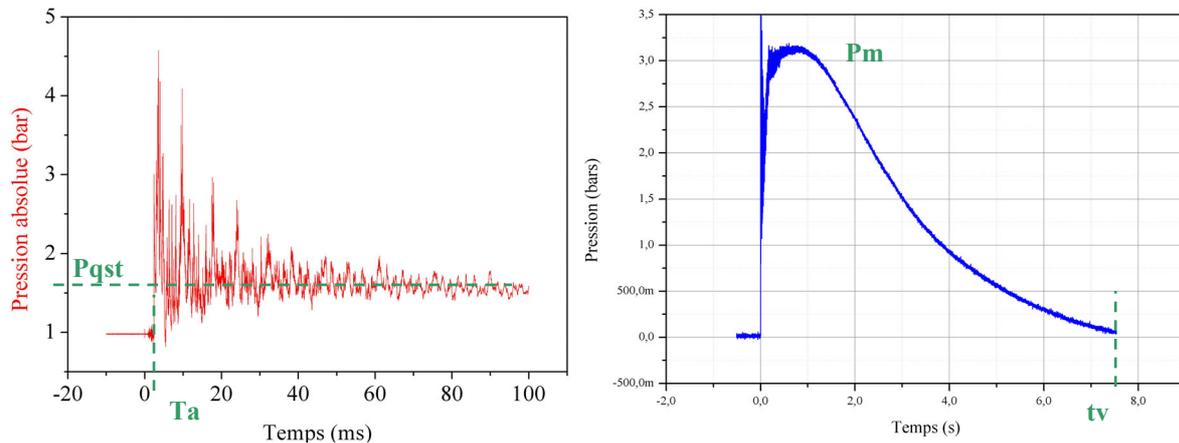


Figure B14 Signaux de pression, typiques d'une détonation en milieu clos – gauche : signal issu d'un capteur piézoélectrique sur 100 ms – droite : signal issu d'un capteur résistif sur 10 s.

Il est possible de noter sur la figure B14 les éléments remarquables suivants :

- le temps d'arrivée de la première onde de choc T_a ,
- le niveau de pression quasi-statique atteint après combustion des produits de détonation P_{qst} ,
- le niveau de surpression maximale P_m ,
- le temps de vidange (retour à l'équilibre en pression avec l'extérieur) t_v .

Les moyens de mesure mis en œuvre doivent être capables de restituer les variations rapides de pression dues aux ondes de choc (temps caractéristique de propagation de l'ordre de 1 ms pour une amplitude de l'ordre de 1 à 10 bars), ainsi que la variation de la pression quasi-statique du milieu (composante continue du signal). L'évolution du champ de pression à l'intérieur du volume d'étude s'accompagne également d'une élévation forte de la température du milieu.

Dès lors, on utilise lors de chaque expérimentation, deux (ou plus) types de capteurs, fonctionnant sur le principe de la piézoélectricité : des capteurs piézo-électriques d'une part, des capteurs piézo-résistifs d'autre part.

Les capteurs *piézoélectriques* utilisent la propriété que possèdent certains cristaux de se polariser électriquement lorsqu'ils sont soumis à des contraintes mécaniques. On peut citer parmi les cristaux les plus utilisés le quartz.

Les capteurs *piézo-résistifs* sont généralement constitués de fils ou de dépôts en couche mince de matériaux dont la résistivité électrique varie sous l'effet d'une variation de pression (on citera comme matériaux le manganin, le carbone et l'ytterbium). La résistance apparente de la partie sensible varie alors et on mesure une variation de tension généralement aux bornes d'un pont de Wheatstone alimenté par un courant continu.

Il faut noter que les matériaux « piézo » présentent des propriétés pyro-électriques et doivent donc être protégés face à des agressions thermiques.

Les cristaux mentionnés affichent également une fréquence de résonance naturelle, qui peut varier selon les contraintes appliquées.

Pour transporter et pour pouvoir analyser les courants électriques générés par l'élément « piézo », il faut associer au capteur proprement dit un dispositif électronique. Deux méthodes d'exploitation sont possibles :

- L'amplification de charge : il s'agit d'un circuit intégré monolithique, pouvant se loger dans le capteur lui-même. Le transport du signal est alors grandement facilité.
- L'adaptation d'impédance : on utilise un électromètre à très haute impédance d'entrée. Logé à proximité du capteur, cet élément permet d'obtenir un signal issu d'un générateur à basse impédance, ce qui facilite son transport tout en ne nuisant pas aux propriétés capacitives de la ligne de mesure.

Dans les deux cas, l'ensemble de la chaîne de mesure et plus particulièrement les câbles de connexion doivent être pris en compte pour évaluer un circuit R,L,C équivalent. En effet, quel que soit le type de capteur, la fonction de transfert de la chaîne de mesure est a priori du 2^e ordre, impliquant une réponse à un échelon sous la forme d'une oscillation amortie. La connaissance du circuit équivalent permet également d'analyser la capacité du capteur à retranscrire une composante continue du signal tout comme une variation brusque de pression. Cette bande passante est le fruit d'un compromis entre ces deux propriétés : si le capteur est capable de « tenir » une valeur stationnaire de pression, alors il dispose d'un temps de décharge « RC » long, au détriment le plus souvent du temps de réponse. A contrario, les capteurs répondant rapidement à une variation de pression ne sont pas capables de contrarier les courants de fuite au travers du montage.

B.3.1 Capteurs piézoélectriques utilisés

Les capteurs choisis sont des capteurs PCB 113Axx (ou 112Axx selon la gamme de pression). Les capteurs PCB sont des capteurs piézo – électriques, utilisant le quartz comme élément transducteur. La température de flash admissible est de l'ordre de 1650°C. Le fournisseur préconise une protection standard de l'élément sensible face aux agressions thermiques. Par exemple, le capteur 113A34 a les caractéristiques statiques et dynamiques suivantes (données constructeurs) :

113A34

Amplitude	Sensibilité	72,56 +/- 3,62 mV/bar
	Résolution	1,37.10⁻³ bar
	Etendue de mesure dynamique	De 1,37.10⁻² à 68,9 bars
	Pression maxi	689 bars
	Linéarité	< 1% de la plaine échelle
Réponse fréquentielle	Fréquence de résonance	>500 kHz
	Temps de réponse	< 1 µs
	Constante de temps de décharge	> 1 s

Tableau B1 Principales caractéristiques des capteurs PCB 113A34

La précision du capteur est de l'ordre de 0,1% (réponse à un échelon). La constante de temps de décharge est de l'ordre de 1 seconde ce qui peut s'avérer rédhibitoire dans certaines configurations.

B.3.2 Capteurs piézo-résistifs

Les capteurs piézo-résistifs retenus sont :

- des capteurs ENDEVCO 8540
- des capteurs Kulite/XTEH.

Ces deux types de capteurs affichent les caractéristiques générales suivantes :

- erreur inférieure ou égale à 0,1% (en réponse à un créneau de pression),
- temps de décharge infiniment long (par rapport au temps caractéristique des évènements mesurés) supérieur à 100 s.
- temps de réponse à 83% de l'ordre de 1,8 μ s,
- fréquence propre de l'ordre de 500 kHz.

D'une manière générale, les capteurs de pression sont testés et étalonnés en tube à choc, afin de connaître la fonction de transfert de la chaîne de mesure complète (transducer, câbles de connexion et électronique associée) soumise à un créneau de pression et de vérifier la précision de la mesure.

Les fréquences d'échantillonnage sont lors de chaque tir supérieures ou égales à 1MHz, afin d'éviter les phénomènes d'aliasing ou toute perte d'informations. Les chaînes de mesure mise en œuvre ont une fréquence de coupure globale de l'ordre de 700 kHz (300 kHz pour les capteurs piézo R), ce qui permet de filtrer en amont les hautes fréquences perturbatrices, mécaniques ou électroniques. Cette valeur reste toutefois plus élevée que la fréquence de résonance principale des capteurs piézoélectriques : les signaux enregistrés doivent faire l'objet de ce point de vue d'un post-traitement particulier (application d'un filtre numérique passe-bas et reconstruction des signaux). Cet aspect est surtout dommageable pour la mesure de l'amplitude de fronts de choc, ce qui n'est pas l'objet premier de cette étude.

Quel que soit le type de capteurs et quelque soit la chambre de tir, les capteurs sont montés dans le plan d'une paroi plane (paroi latérale pour le bunker, tapes de fermeture pour les chambres cylindriques) à l'aide de montages mécaniques mis au point lors de ces travaux. L'utilisation de plusieurs matériaux (plastique, plomb) permet de s'accommoder des accélérations et ondes perturbatrices générées par la propagation des chocs dans les parois en acier des enceintes de tir (figure B14).



Figure B15 Fixations en paroi des capteurs de surpression interne – gauche : capteur PCB avec protection thermique – milieu : capteur résistif – droite : douille de montage externe

La dérive thermique des éléments transducteurs soumis à un fort rayonnement et un environnement sous haute température, est contrée par l'utilisation d'une graisse protectrice (figure B14 Gauche) pour les capteurs piézoélectriques, par la présence d'une grille protectrice pour les capteurs résistifs (figure B14 Milieu). Dans les deux cas, ces éléments de conditionnement induisent des perturbations négligeables (temps de réponse, décalage,...) et permettent de limiter les effets de la dérive thermique à un décalage (« thermal shift ») inférieur à 0,3 % sur un intervalle de temps de l'ordre de 100 ms à 200 ms.

La figure ci-dessous illustre l'absolue nécessité de réaliser une mesure parallèle et en plusieurs points du champ de pression, à l'aide de technologies différentes afin de capturer avec fidélité les variations de P : le signal bleu montre la capacité d'un élément résistif à retranscrire la composante continue de la surpression, alors que la courbe rouge illustre l'efficacité des capteurs piézoélectriques à mesurer les phénomènes rapidement variables. On note cependant que, sur cet exemple en particulier, le signal de pression converge dans les deux cas vers un plateau (la pression quasi-statique maximale atteinte après combustion des produits gazeux, ici 2 bars environ) après 30 ms.

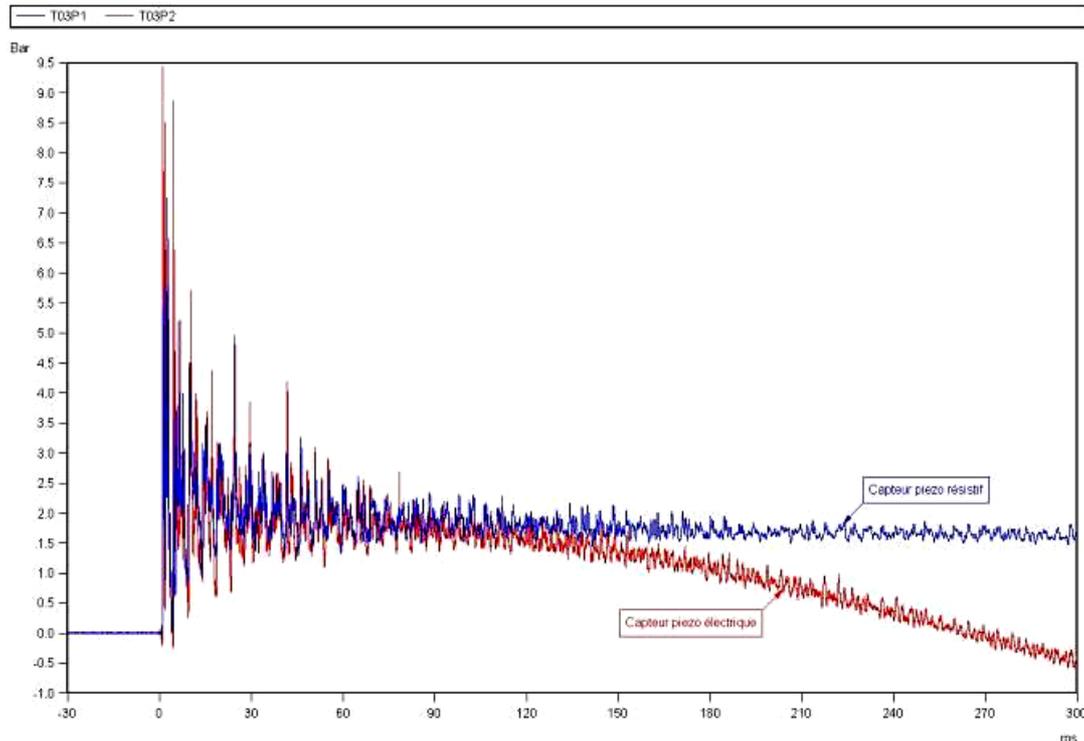


Figure B16 Comparaison des signaux obtenus par un capteur piézoélectrique (rouge) et un capteur résistifs (bleu) – tir bunker – 150 g de V401

B.4 Thermocouples

Lors de certaines expérimentations « bunker » et « Athéna », des thermocouples de types K et B ont été utilisés afin de capturer une image ponctuelle du champ de température interne (figures B5 et B9). En effet, afin de résister aux ondes de choc, le diamètre utile du thermocouple est de l'ordre de 1 mm ce qui induit, dans un écoulement turbulent, des temps de réponses de l'ordre de 400 ms, ce qui est très grand par rapport aux temps caractéristiques des événements.

Malgré l'inertie des capteurs, positionnés de manière symétriques par rapport à la charge explosive, les signaux obtenus permettent de comparer les effets des explosifs testés et également de mettre en évidence les variations locales de T.

B.5 Système numérique d'imagerie ultra-rapide

Ces moyens ont été mis en œuvre uniquement lors des tirs « bunker », cette enceinte disposant de hublot hermétique transparent (verre de qualité optique) afin de visualiser les événements internes lors de l'expérimentation :

- Développement de la boule de feu et réverbérations multiples des ondes de choc,
- Combustion des produits de détonation,
- Eclatement des réservoirs,
- Fragmentation dynamique et évaporation de la phase liquide,...

Les caméras utilisées sont des caméras Photron Fast Cam, à matrice sensible Couleur ou Noir et Blanc. Sur l'ensemble des tirs, dans cette gamme ont été utilisées les caméras APX RS et SA1.

Elles ont pour éléments communs l'utilisation de capteurs CMOS, et une matrice utile de 1026 x 1026 pixels. Les capteurs permettent un codage des niveaux de gris (capteur monochrome) ou en {Rouge, Vert, Bleu} sur 10 bits.

Les hublots du bunker donnent la possibilité d'une visualisation simultanée suivant trois axes, comme le montre la figure B16. Les systèmes optiques centrés associés rendent possible une visualisation de l'ensemble du volume intérieur du bunker, la profondeur de champ de chaque caméra étant suffisante (objet image à l'infini ou plan net de visualisation dans un plan de symétrie du bunker).



Figure B17 Système de visualisation numérique ultrarapide – mise en place de 3 caméras couleur Photron Fast Cam – Gauche : vue latérale – droite : vue supérieure – milieu : vue de face et vue latérale

Ces moyens permettent en premier lieu une analyse qualitative des événements (description quasi-3D des phénomènes), et la détermination de leurs chronologies.

Typiquement, les fréquences d'acquisition sont de 3000, 10 000, et 30 000 images par seconde, pour des résolutions respectives de 1024 x 1024, 512 x 512 et 256 x 256 pixels. Les temps d'ouverture peuvent être réduit jusqu'à 2 μ s en fonction de la luminosité de l'évènement observé.

Les images obtenues sont au format « .tiff » (sur 8 bits soit 256 niveaux) et constitue une matrice 2D d'informations utilisables par post-traitement (§ D.2).

Les figures ci-dessous sont des exemples d'image obtenues lors de l'explosion d'une charge à l'intérieur du bunker (vue de face à $t_0 + 1$ ms et séquence complète sur 2 ms).



Figure B18 Exemple d'image enregistrée par la caméra APX RS – vue de face de l'intérieur du bunker



Figure B19 Extrait d'une séquence d'enregistrement – développement de la boule de feu dans le bunker, vue de face

NB : Quel que soit le type d'expérience, l'ensemble du système d'acquisition est déclenché sur le trigger général de l'expérimentation, c'est-à-dire l'ordre de mise de feu. Une sonde à ionisation collée sur l'explosif permet de recalibrer l'ensemble des signaux et images sur une base de temps commune : la sonde à ionisation transmet une information électrique lorsque l'onde de détonation débouche à la surface de la charge.

C. Expérimentations réalisées

Les tableaux ci-dessous recensent l'ensemble des expérimentations DMC réalisées aux cours de la thèse, ainsi que les données d'entrées principales et moyens de mesure mis en œuvre : taux de chargement, topologie du liquide, type de charge, etc. Chaque expérimentation DMC se voit attribuer un numéro de tir B-200x – n : type d'enceinte-année – n°.

C.1 Signification des abréviations employées :

1/ Enceintes de tir :

- B : Bunker, 1,875 m³
- A : Chambre Athéna 2,356 m³
- S : Chambre Sirocco 33 m³

2/ Description de la phase liquide

- F : sous forme de flaque
- C : sous forme de containers (bidons de 0,5 litres chacun)

3/ Moyens de mesure et d'observation :

- P : surpression interne
- T : thermocouples
- Visu.int : visualisation interne
- Visu.ext : visualisation extérieure

C.2 Positions du produit liquide / zones initiales :

Pour les expérimentations « bunker » en présence de produits liquides, on définit 4 positions initiales possibles comme le montre le schéma suivant :

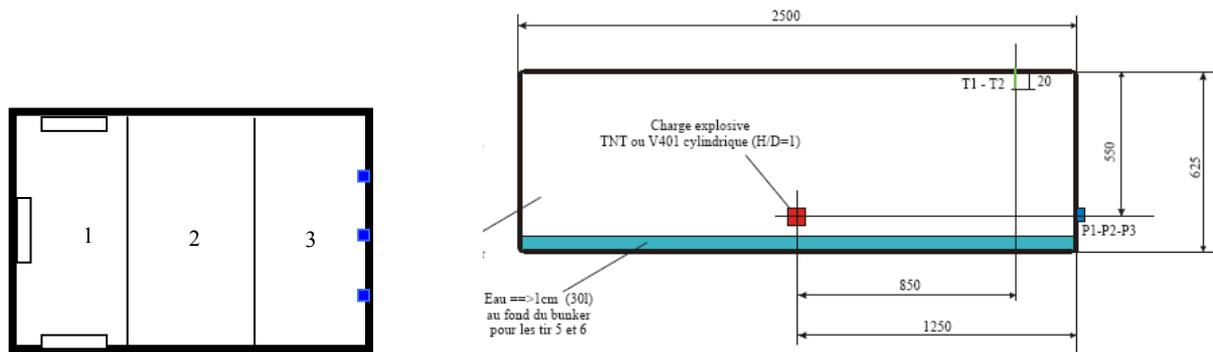


Figure B20 Définition du positionnement initial des produits liquides dans le bunker

Le bunker est divisé en 3 zones de mêmes dimensions. La position « 4 » correspond à une flaque de liquide qui s'étend sur l'ensemble du plancher, ou à un positionnement aléatoire des bidons de stockage.

C.3 Tirs de validation des enceintes

Avant la réalisation de toute expérimentation, des tirs d'épreuves ont été réalisés afin de tester la résistance mécanique de l'enceinte de tir (face aux variations de pressions dynamique et statique), l'étanchéité des éléments amovibles ou consommables (hublots en verre, hublots métalliques, passages de câbles) et les systèmes d'amorçage. Ces tirs ne sont pas relatés ici.

Tirs « Bunker »

NTir	Date	Amorçage		Charge explosive		Phase liquide						Systèmes de Mesure					
		Amorce	Booster M01 (g)	Matière	Masse charge primaire (g)	Eclats	Dim (mm)	Type	Position	Forme	Dimensions	Quantité (litres)	Pression p1z0E	Pression p1z0R	Thermocouples	Visu Int	Visu Ext
B	2004-1	RP80		V401	123,52		H=95 D=30						X		X		X
B	2004-2	RP80		V401	123,6		H=95 D=30						X		X		X
B	2004-3	RP80		V401	123,5	X	H=95 D=30	Eau	4	C			X		X		X
B	2004-4	RP80		V401	123	X	H=95 D=30	Eau	1	C			X		X		X
B	2004-5	RP80		V401	123,6	X	H=95 D=30	Eau	1	C			X		X		X
B	2004-6	RP80		V401	242,8		H=55 D=55						X		X		X
B	2005-1	RP80		V401	125	X	H=95 D=30	TMP	1	C			X		X		X
B	2005-2	RP80		V401	125	X	H=95 D=30	TMP	1	C			X		X		X
B	2005-3	RP80		V401	125	X	H=95 D=30	TMP	1	C			X		X		X
B	2005-4	RP80		V401	125	X	H=95 D=30	TMP	4	C			X		X		X
B	2005-5	RP80		V401	125	X	H=95 D=30	TMP	4	C			X		X		X
B	2006-1	RP80	10,6	TNT	138,2		H=D=54,5						X		X		X
B	2006-2	RP80	10,7	TNT	188		H=D						X		X		X
B	2006-3	RP80		V401	99,7		H=D=41						X		X		X
B	2006-4	RP80		V401	190,2		H=D						X		X		X
B	2006-5	RP80		V401	99,8		H=D=41	Eau	4	F	h=18,2 cm		X		X		X
B	2006-6	RP80		V401	150,3		H=D	Eau	4	F	h=18,2 cm		X		X		X
B	2006-7	RP80		V401	123,8	X	H=95 D=30	Eau	1	C			X		X		X
B	2006-8	RP80		V401	123,7	X	H=95 D=30	Eau	1	C			X		X		X
B	2007-1	RP80	10,5	TNT	88,7		H=D=43						X		X		X
B	2007-2	RP80	10,5	TNT	88,7		H=D=43	Eau	4	F	h=18,2 cm		X		X		X
B	2007-3	RP80		V401	151,1		H=D=54						X		X		X
B	2007-4	RP80		V401	123,7	X	H=95 D=30	Eau	1	C			X		X		X
B	2007-5	RP80		V401	123,7	X	H=95 D=30	Eau	1	C			X		X		X
B	2008-1	RP80		V401	99,7		H=D=41	Eau	2	F	120x80		X		X		X
B	2008-2	RP80		V401	99,8		H=D=41	Eau	2	F	120x80		X		X		X
B	2008-3	RP80		V401	99,8		H=D=41						X		X		X
B	2008-4	RP80		V401	99,8		H=D=41	Eau	2	**	φ=260mm, H=70 mm		X		X		X
B	2008-5	RP80		V401	99,7		H=D=41	Eau	1	F	120x80		X		X		X
B	2008-6	RP80		V401	99,9		H=D=41	Eau	1	F	120x80		X		X		X
B	2008-7	RP80		V401	99,7		H=D=41	Eau	1	F	120x80		X		X		X
B	2008-8	RP80		V401	99,7		H=D=41	Eau	1	F	120x80		X		X		X
B	2008-9	RP80		V401	99,7		H=D=41	Eau	2	F	120x80		X		X		X
B	2008-10	RP80		V401	99,7		H=D=41	Eau	2	F	120x80		X		X		X
B	2008-11	RP80		V401	99,7		H=D=41	Eau	2	**	φ=260mm, H=70 mm		X		X		X
B	2008-12	RP80		V401	99,7		H=D=41	Eau	1	F	120x80		X		X		X
B	2009-1	RP80	10,5	TNT	142		H=D=55						X		X		X
B	2009-2	RP80	10,5	TNT	245		H=D=66						X		X		X

Tableau B2 Récapitulatif des tirs « bunker » et données d'entrées des expérimentations

Tirs dans les chambres Athéna et Sirocco

N°Tir	Date	Amorçage		Charge explosive			Phase liquide				Systèmes de Mesure						
		Amorce	Ecouler V401 [g]	Matière	Masse charge principale [g]	Eclats	Dim (mm)	Type	Position*	Forme	Dimensions	Quantité [litres]	Pression piézoE	Pression piézoR	Thermocouples	Visu Int	Visu Ext
A 2005-1	10-avr	RP80		V401	50		D= 37						X				X
A 2005-2	10-avr	RP80		V401	100		D= 47						X				X
A 2005-3	11-avr	RP80		V401	50		D= 37						X				X
A 2005-4	14-mai	RP80		V401	100		D= 47						X				X
A 2005-5	14-mai	RP80	10	TNT	143		D=55						X				X
A 2005-6	15-mai	RP80	10	TNT	145		D=56						X				X
A 2006-1	08-mai	RP80		V401	50		D= 37	Eau	4	F			X				X
A 2006-2	10-mai	RP80		V401	100		D= 47	Eau	4	F			X				X
A 2006-3	10-mai	RP80		V401	150		D=54	Eau	4	F			X				X
A 2006-4	11-mai	RP80	10	TNT	150		H=D=50						X				X
A 2006-5	11-mai	RP80	10,5	TNT	200		H=D=54						X				X
S 2009-1	01-févr	Condeau déto.		V401	500		H=D						X				X
S 2009-2	02-févr	Condeau déto.		V401	1000		H=D						X				X
S 2009-3	01-juil	Condeau déto.		TNT	745		H=D=84						X				X
S 2009-4	02-juil	Condeau déto.		TNT	986		H=D=93						X				X

Tableau B3 Récapitulatif des tirs Athéna et Sirocco et données d'entrées des expérimentations

D. Post traitement des enregistrements et grandeurs physiques accessibles

D.1 Post traitement des signaux de pression

Après recalage temporel des signaux, on réalise deux types de post-traitement :

- D'une part, pour améliorer la qualité du signal,
- D'autre part, pour déterminer des grandeurs physiques nécessaires à la compréhension et la modélisation.

Les différentes opérations mathématiques (transformée de Fourier, filtrage, lissage, etc.) sont réalisées grâce aux logiciels de calcul et de traitement de données Origin8 et Matlab®.

D.1.1 Prise en compte de la fonction de transfert de la chaîne de mesure

Cette fonction est connue grâce à l'étude des chaînes de mesure au tube à choc. Les fréquences caractéristiques de la chaîne sont donc également connues ou fixées avant l'expérience : fréquence d'échantillonnage f_e , fréquence de résonance f_r , fréquence de coupure f_c . On applique au signal mesuré un premier filtre passe-bas, afin d'éliminer les hautes fréquences sources de bruit. Les montages mécaniques d'adaptation d'impédance absorbent a priori une grande partie de ces fréquences.

D.1.2 Détermination de la composante quasi-statique du signal de surpression

Le signal enregistré est filtré afin de ne faire apparaître que la composante continue du signal (figure B20). Typiquement, on choisit une fréquence de coupure de l'ordre de 50 Hz (cf. Partie II), fréquence qui a un sens « physique » par rapport à la propagation des chocs et des ondes acoustiques dans le milieu étudié.

Le filtre passe-bas est appliqué soit au signal de mesure complet (figure de gauche) recalé temporellement, soit à partir du pied du premier choc capturé par le capteur de pression (courbes de droite). Il en résulte deux courbes résolument distinctes lors des premiers instants.

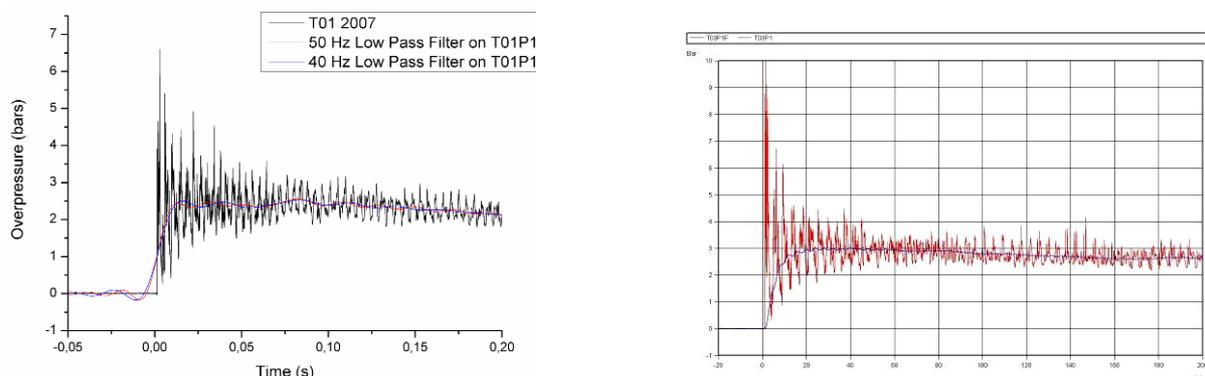


Figure B21 Application d'un filtre passe bas pour détermination de la composante continue du signal de surpression interne.

La courbe résultante, par exemple la courbe bleue sur la figure ci-dessus, peut être modélisée par une fonction dite de Wiebe (cf. Partie II), fonction temporelle issue d'opérations mathématiques de base sur des fonctions exponentielles croissantes définies dans Origin8. Cette fonction de « fitting » est appliquée à chaque signal filtré, afin de déterminer des paramètres caractéristiques de la combustion interne à l'enceinte. Origin8 permet en effet, à partir d'un jeu initial de paramètres, une optimisation automatique de l'approximation. On déduit de ce traitement les grandeurs définies en Partie II, T_b , le temps de montée en pression à 95% (après recalage temporel), et P_{qst} , la surpression quasi-statique atteinte dans le bunker, correspondant au plateau visible sur les courbes ci-dessus (valeur maximale de la composante continue, obtenue au point d'inflexion de la courbe filtrée).

D.1.3 Analyse du spectre du signal pour de faibles variations de pression

Les signaux enregistrés sont d'origine *numérique* et stockés sous forme discrétisée au format ASCII. Le post-traitement suit ici les étapes suivantes :

- Sélection d'une « zone d'intérêt » (action de l'opérateur) : la justification de l'analyse spectrale est détaillée en Partie II. On cherche à déterminer l'information sous-jacente aux variations de pression lorsque la pression quasi-statique est atteinte, c'est-à-dire lorsque les variations de P autour de P_{qst} sont inférieures ou égales à 15%. (figure B21, courbe de gauche).
- Application d'une opération mathématique de « fenêtrage » (rectangle, triangle, Gaussienne, dite de Hanning, Hamming, etc.) pour analyse de la partie sélectionnée à horizon temporel fini. Cette opération semi-automatique, sous un logiciel comme Origin8, permet de s'affranchir du spectre lié à la longueur de la fenêtre d'information (apparition de lobes secondaires) et la perte d'informations ;
- Application de l'algorithme FFT (Fast Fourier Transform) aux données sélectionnées ;
- Normalisation du spectre de puissance (Power Density or Spectrum) pour augmenter le contraste des fréquences dominantes par rapport à la répartition totale de l'énergie ;
- Relevé de fréquences correspondantes aux pics principaux, pour des fréquences inférieures ou égales à 1000 Hz, ce qui correspond au domaine physique que l'on souhaite explorer (propagation d'ondes simples et acoustiques dans le milieu).
- Détermination de la largeur à mi-hauteur des pics de densité spectrale (résolution fréquentielle).

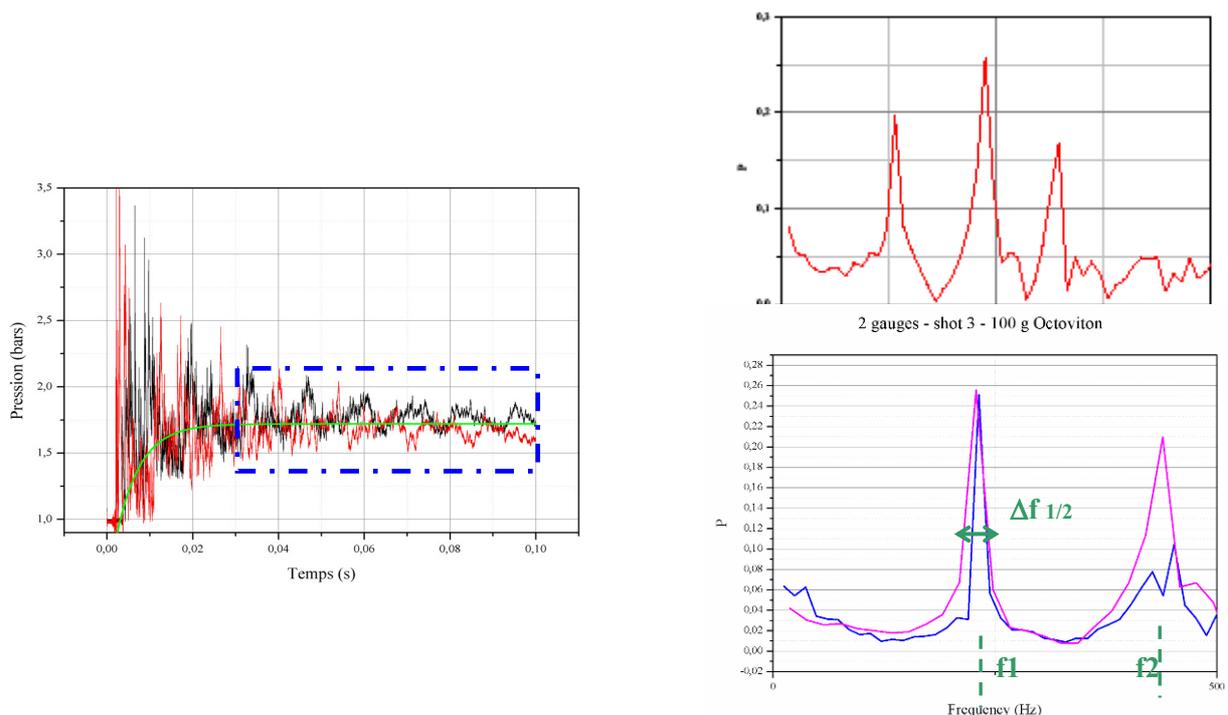


Figure B22 Analyse spectrale des signaux de pression Gauche : Sélection de l'intervalle à analyser - droite : exemple de spectres obtenus – En bas, comparaison de deux spectres obtenus grâce à deux capteurs différents (E et R), lors d'un même tir.

D.1.4 Reproductibilité des signaux

La reproductibilité des mesures de surpression a été éprouvée par la réalisation de plusieurs tirs (3) dans des configurations identiques. Les chaînes de mesure démontrent une très bonne reproductibilité, comme le montrent les figures B22 et B23 :

- Les faibles écarts constatés sont inhérents à la mise en place manuelle de la charge d'une part, aux différences de temps de fonctionnement du système {exploseur + ligne de mise de feu + amorce} et la précision d'usinage de la charge explosive d'autre part. Ces deux sources engendrent une erreur négligeable par rapport aux échelles de temps des phénomènes observés.
- La reproductibilité de la mesure se constate visuellement par la superposition des temps d'arrivée des ondes de choc (courbes bleue et rouge), et par la valeur du plateau de surpression quasi-statique (écart relatif inférieur à 0,5%).
- L'intégration des signaux (figure B23) permet également de statuer sur la qualité de la mesure : quel que soit t, l'écart entre les deux intégrales est inférieur ou égal à 0,1%.

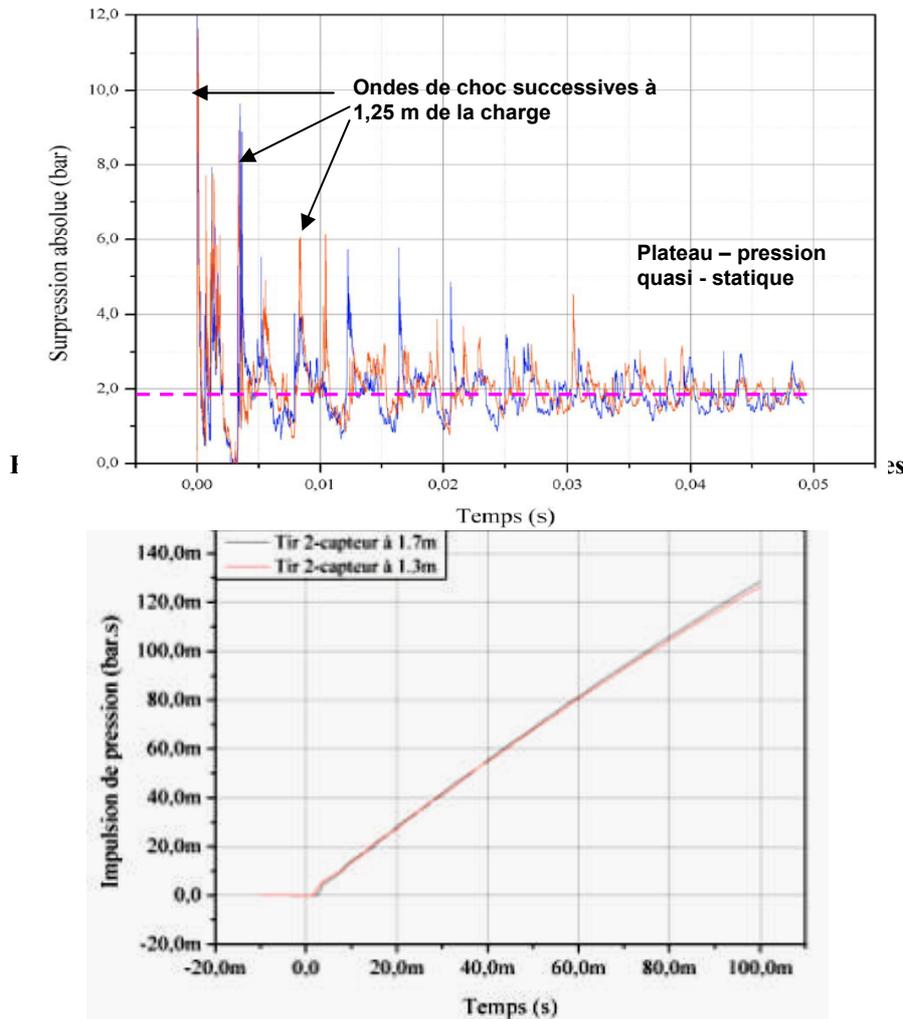


Figure B23 Comparaison des intégrales de P obtenues lors de deux tirs identiques

D.2 Post traitement des enregistrements vidéo

Les enregistrements vidéo des tirs bunker sont post-traités afin de déterminer des grandeurs physiques nécessaires à la modélisation de la combustion des produits de détonation et aux transferts d'énergie ou de masse entre phases.

Les fichiers « image » résultants constituent une base de données conséquente, sur une couche d'informations (256 niveaux de gris) pour les caméras « N et B », 3 couches codées, chacune sur 256 niveaux (ou plus selon le format de sauvegarde) pour les caméras « couleur ».

Lors des tirs 2007, 2008 et 2009, la vue dite de face (hublot sur une largeur du bunker) a été enregistrée de manière identique lors de chaque expérimentation : caméra Photron Fast Cam Couleur APX RS, paramétrée à une fréquence d'enregistrement de 30 000 i/s, pour un temps de pose de 1/100 000^e, (obturateur double pente non utilisée), pour une résolution de 256 par 128 pixels. Le plan focal objet se situe à une distance de 1435 mm de l'objectif de la caméra, ce qui le situe dans le plan de symétrie verticale du bunker, dans le sens de la longueur.

La conservation des paramètres de réglage d'un tir à l'autre et l'utilisation d'une tête optique identique permet de comparer les effets des différentes charges explosives (comparaison des niveaux de luminance pour chaque pixel de la matrice).

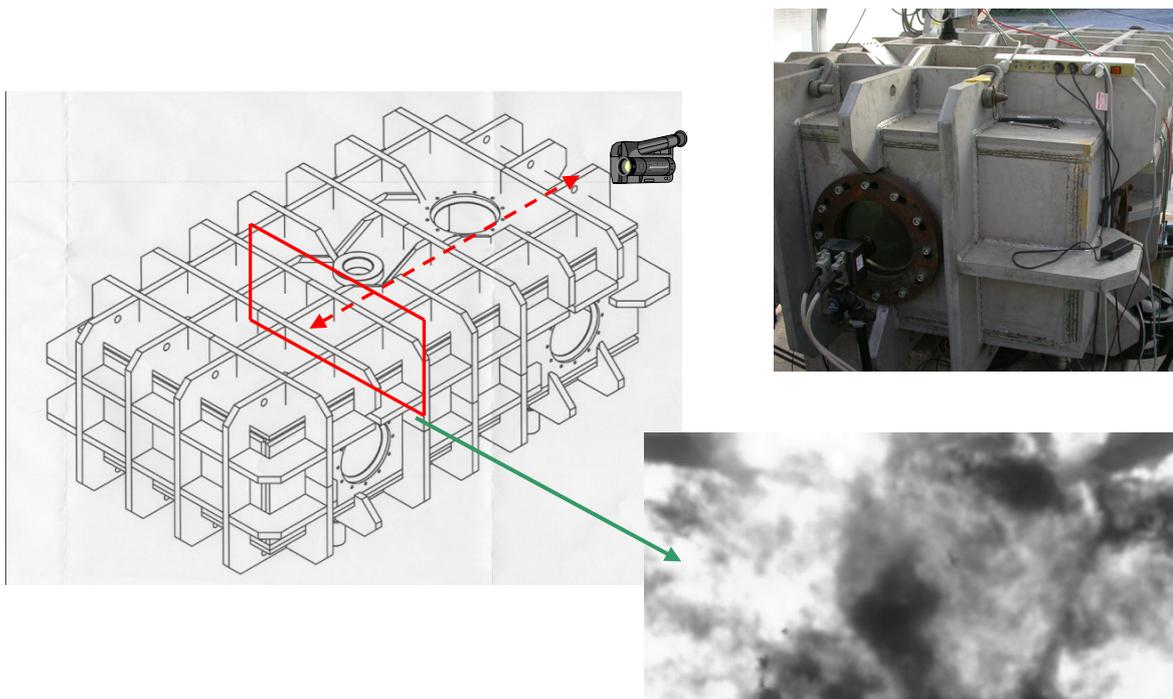


Figure B24 Visualisation du développement de la boule de feu – enregistrement sur un plan de symétrie du bunker

Afin de traiter et organiser ce grand nombre d'informations, une méthode de dépouillement a été élaborée et un logiciel créé, sous un environnement Labview[®] - Vision Toolkit. En effet, pour une séquence de 1000 images, codées sous 8 bit par exemple, et 3 couches d'information, on dispose de 1000 x 256 x 128 x 3 données, soit un peu moins de 100 millions.

La figure B25 est un aperçu de l'interface HM de cette application, qui permet dans un premier temps de sélectionner une zone d'intérêt parmi l'échantillon à analyser. Pour modéliser les effets internes au milieu

d'étude, on se focalise sur les variations du champ de luminance en fonction du temps, le mélange turbulent étant directement influencé par la réverbération des ondes de choc sur les parois. Compte tenu des plans de symétrie inhérents au dispositif, on choisit d'étudier trois « lignes » ou sous-matrices, apparaissant en vert sur la fenêtre de paramétrage :

- une sous – matrice horizontale H de dimensions 256 x n, où n est fixé par l'opérateur,
- une sous-matrice verticale V de dimensions n x 128,
- une sous-matrice diagonale D de dimensions n x 128 (ou 256),

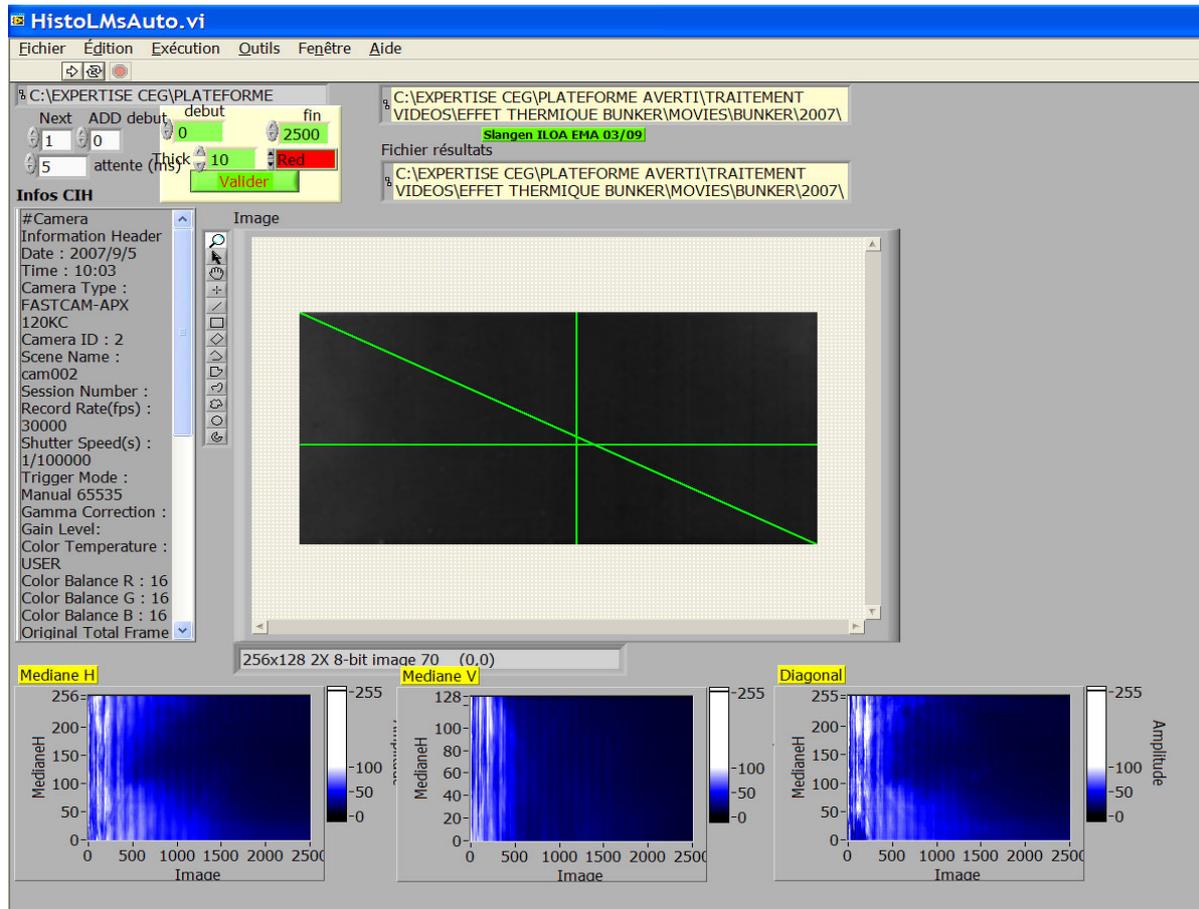


Figure B25 Interface Homme Machine du module de dépouillement d'images

Pour chaque image, on calcule alors la valeur de luminance moyenne sur n pixels de chaque colonne pour H, de chaque ligne pour V (et D), ce qui donne en sortie un tableau de 256 ou 128 valeurs.

Au final, il est possible de tracer, comme indiqué sur la figure B26, une cartographie $1D(t)$ de la variation de la luminance spectrale (dans le rouge, le vert ou le bleu pour les images couleurs). La fenêtre de gauche fait apparaître, dans le cas précis d'un tir « bunker », les informations les plus intéressantes (variation de L en fonction de la propagation verticale des ondes). Les zones claires correspondent évidemment à un rayonnement intense (saturation à $N = 256$).

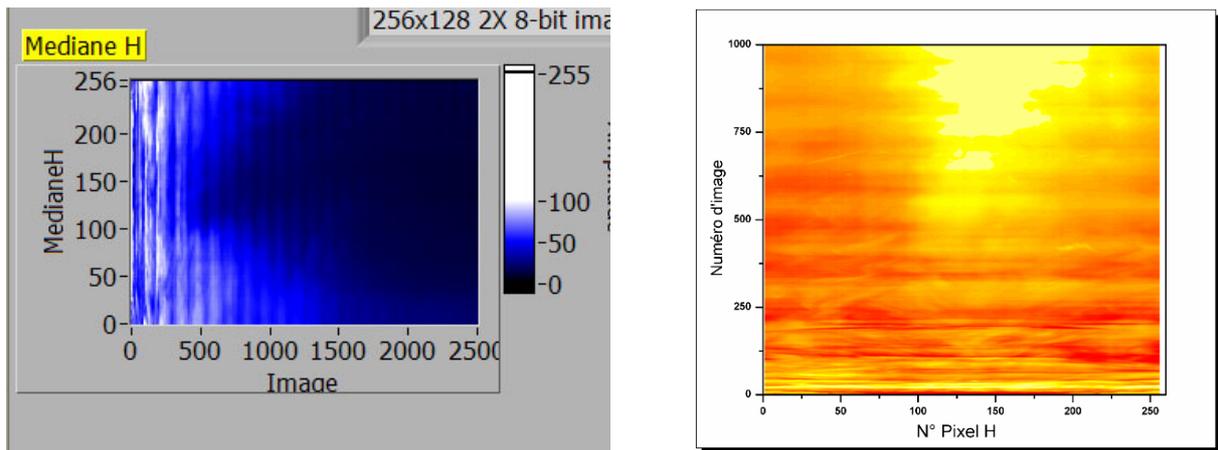


Figure B26 Cartographie 1D(t) de la luminance spectrale enregistré suivant H - sortie d'écran à gauche - exploitation sous Matlab ® à droite

Afin de comparer les phénomènes de combustion secondaire selon le type d'explosif utilisé, il est possible d'extraire des « cartes » ci-dessus un réseau de courbes 0D(t), pour un numéro de pixel fixé (numéro de colonne de la sous-matrice horizontale). Sur la figure B27, on trace les variations de la luminance spectrale en fonction du temps (du n° d'image) pour la colonne n° 230 (trait jaune vertical), ce qui correspond physiquement à une zone proche d'une paroi du bunker.

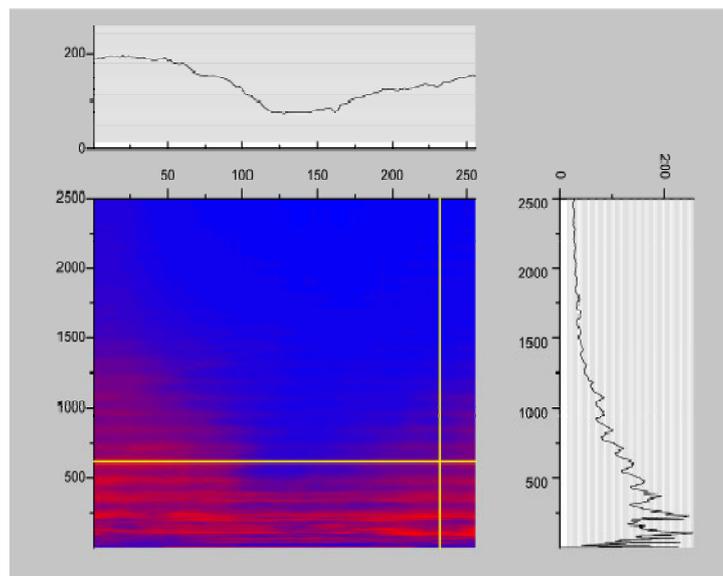


Figure B27 Extraction de courbes pour un n° de pixel donné – dépendance temporelle de la luminance spectrale

L'influence de la taille de la sous-matrice sur la qualité de l'information restituée a été étudiée : comparaison des courbes finales pour une moyenne de la luminance sur une bande de 1, 2, 5, 10, 20, etc. pixels. En effet, un pixel correspond physiquement à une surface de 25 mm² dans le plan de visualisation. Une bande de 1 pixel est trop étroite et les variations de luminances peuvent être dues à la présence de solides (systèmes de montages) ou d'artefacts numériques. Une bande de 10 pixels est un bon compromis entre la résolution spatiale de la « mesure » et le niveau de bruit engendré. La fréquence d'échantillonnage peut également être optimisée selon la quantité ou le type d'explosif utilisé. Pour des raisons de clarté, on ne détaille pas dans ce mémoire ces essais paramétriques et autres travaux d'optimisation du procédé de dépouillement. On retiendra que, pour une séquence de 3000 images, soit un temps physique de 100 ms, et une opération de moyenne sur une bande de 5 pixels, il faut un temps de calcul, sur un PC standard, de 10 secondes environ pour afficher une cartographie complète de l'explosion.

Pour finir cette annexe, on montre deux exemples de résultats obtenus grâce à cette méthode de dépouillement. Le niveau maximal de luminance ainsi que la forme des courbes sont directement fonction du type de charge (type d'explosif – masse d'explosif).

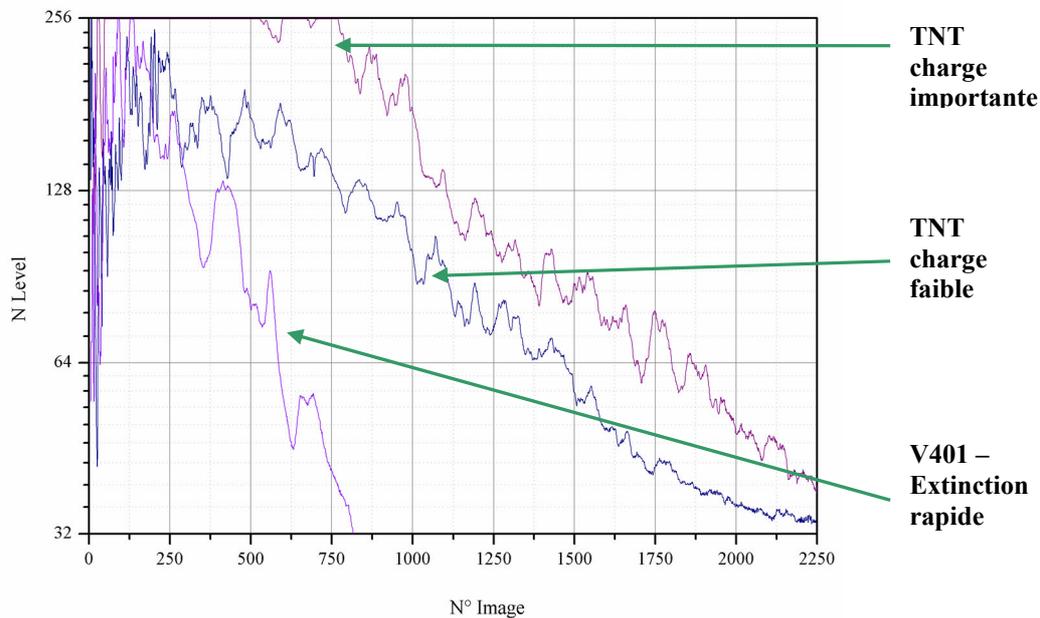


Figure B28 Comparaison de la luminance spectrale générée par 3 charges différentes (abscisse colonne n°230)

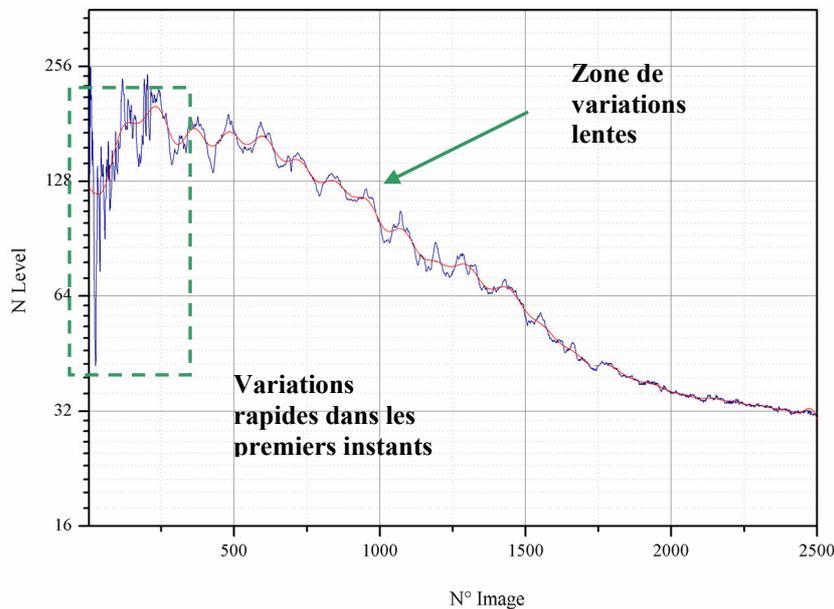


Figure B29 Forme caractéristique d'une courbe OD(t) de luminance spectrale pour une explosion en milieu clos – en rouge courbe obtenue après lissage

La figure B29 permet de mettre en évidence le fort niveau d'innovation du signal de luminance, pour un explosif et une abscisse donnée. La première partie du signal montre de fortes variations, et des fréquences caractéristiques élevées. C'est la phase initiale de développement de la boule de feu et de rebonds des ondes de choc fortes contre les parois. Le signal tend ensuite à suivre des variations plus lentes, et le signal contient des fréquences plus faibles, en adéquation avec les fréquences relevées par analyse spectrale des signaux de pression interne à la chambre de détonation.

E. Commentaires

Au total, 53 tirs ont été réalisés : 24 avec un explosif seul, 29 en présence de liquide (de l'eau ou du TMP). Pour ne parler que de ce type de mesure, 150 signaux de pression ont été enregistrés pour un taux d'échec inférieur à 3% (non déclenchement du système de mesure, défaut de fonctionnement, impact de fragments sur le capteur, etc.)

- Choix des paramètres de tirs / utilisation de plans d'expérience

Ce nombre de tir a été fixé principalement par des contraintes de temps (délai de conception, délai de réalisation), économiques et environnementales, mais également par la possibilité ou non de faire varier les paramètres tels que la masse d'explosif, le volume de la chambre, etc.

Une méthodologie de type plan d'expériences ne peut être que partiellement appliquée à notre étude.

En effet, si l'on peut imaginer sur certaines plages de données, un comportement linéaire des grandeurs de sorties telles que la pression quasi-statique engendrée par une masse m d'explosif, dans un volume V , grâce notamment aux résultats d'expérimentations préliminaires et des résultats de la bibliographie, il n'en est rien sur l'ensemble du domaine thermodynamique exploré, notamment lorsque l'on considère la présence d'une phase liquide. Par exemple, la connaissance des conditions initiales telles que la surface d'échange entre phase, et leurs évolutions temporelles, sont essentielles à la compréhension des phénomènes.

De plus, l'objectif principal du sujet est de démontrer la possibilité de réduction de l'évolution d'un système fermé ou partiellement ouvert en un modèle 0D instationnaire. Les expérimentations réalisées doivent donc permettre une compréhension *qualitative et quantitative* des différents sous-phénomènes, ainsi que leurs couplages temporels. Les expérimentations doivent donc permettre d'accéder à des données sans perte d'informations a priori par une quelconque méthode de projection.

L'illustration la plus parlante des difficultés supplémentaires que l'application d'une méthode de type plan d'expérience engendrerait, est l'évaluation par méthode indirecte du champ de température interne : le calcul de transformée de Fourier des signaux de pression permet de changer d'espace de travail, du temporel au fréquentiel, changement d'espace qui ne peut s'accommoder d'une projection a priori.

Les données d'entrées sont toutefois fixées par *une analyse des facteurs à étudier* et les domaines d'études associés. Les masses relatives de produits liquides, gazeux ou solides sont également réalistes par rapport aux cas réels qu'il est demandé de modéliser.

- Conditions extérieures et conditions limites :

L'ensemble des expérimentations DMC ont été réalisées en extérieur ou sous abris partiel. Les conditions en température ont une amplitude annuelle de l'ordre de 40 °C (entre - 10°C et + 30 °C). Les valeurs de surpression et résultats des mesures données dans le mémoire (écarts de température, état initial des phases liquides, etc.) tiennent compte des conditions atmosphériques initiales.

D'autre part, de par les moyens de mesure mis en œuvre et l'utilisation récursive d'explosif, l'étanchéité parfaite des chambres de détonation ne peut être assurée : les surfaces de fuite sont toutefois négligeables sur la durée du processus étudié, la surpression interne s'annulant quelques minutes après la détonation de la charge. Lorsqu'une ouverture est volontairement pratiquée (surface de fuite sur le toit du bunker), les débits secondaires au travers les éventuelles autres fuites sont également négligeables.

Enfin, on considère également les pertes thermiques aux parois par conduction (et la chute de pression associée) comme négligeables sur une durée de 100 ms après l'explosion de la charge. Sur un intervalle plus long (de l'ordre de une seconde), l'échauffement des parois absorbe une partie non négligeable de l'énergie

du système ce qui participe à la chute de pression du milieu. En effet, les chambres de détonation sont en acier traité, et les parois ont une épaisseur de 1 à 5 cm, ce qui nous donne, en prenant un coefficient de diffusivité thermique de $0,125 \times 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}$, un temps caractéristique de 8 secondes pour une longueur de 1 cm, et un temps de pénétration à 20 % de 735 ms, selon la formule :

$$p_{time} = \left[\frac{L}{1.65} \right]^2 \times \frac{\rho C_p}{4k}$$

- Produits liquides retenus :

Dans le cadre de ce mémoire, seules les présences initiales d'eau et de TMP sont étudiées d'un point de vue expérimental. Ce choix repose sur deux aspects :

- d'une part, les contraintes environnementales liées aux sites d'expérimentations,
- d'autre part, leurs propriétés thermo-chimiques.

En effet, l'eau, produit inerte (en combustion) constitue un « pire cas » : la quantité d'énergie nécessaire à apporter pour « détruire » l'eau, c'est-à-dire évaporer totalement ici, est très importante (chaleur latente de vaporisation de l'ordre de 2,26 MJ/kg). Le TMP est utilisé dans l'industrie comme solvant, et comme ignifugeant ou retardant, car il a un temps d'initiation en combustion très important. Ce produit permet donc, a priori, de discriminer lors des expérimentations DMC les étapes d'échanges thermiques entre phases et de réactions de dégradations par combustion.

Les quantités d'eau stockées initialement dans les enceintes de tir (2,5, 5, 12 ou 30 litres) sont supérieures à la fraction a priori vaporisable si toute l'énergie de l'explosif était dédiée à sa vaporisation. L'eau est de ce point de vue en « excès » : on se focalise sur les conséquences de la topologie initiale de la phase liquide.

Annexe C Expérimentations de détonation sphérique en champ libre (DCL)

A. Objectifs des expérimentations

La détonation d'une charge explosive de forme sphérique représente un cas d'école pour de nombreux aspects, tant au niveau de l'amorçage et de la propagation de l'onde de détonation qu'au niveau des effets engendrés sur un milieu connexe. D'un point de vue expérimental, l'utilisation d'une configuration sphérique permet de limiter le nombre de paramètres et de disposer d'un volume d'observation non négligeable, les phénomènes ciblés étant a priori isotropes. La comparaison expériences / calculs en est également grandement simplifiée.

Plusieurs types d'expérimentations ont été réalisés sur les sites de détonique du CEA Gramat dans le cadre de cette étude et sont décrites précisément au chapitre suivant. Leurs objectifs principaux sont :

- de déterminer pour plusieurs explosifs condensés, chargés ou non en particules d'aluminium, le diagramme de marche de l'onde de choc aérienne générée par la détonation de la charge ;
- de déterminer, en fonction du temps, le rayon visible de la boule de feu pour chaque explosif et les échelles de turbulence ;
- de déterminer les temps caractéristiques de combustion aérobie des produits de détonation avec l'air ambiant en l'absence d'amplification de la turbulence par réflexion d'ondes ;
- de déterminer un niveau de rayonnement thermique de la boule de feu ;
- de déterminer d'éventuels effets d'échelles.

La figure ci-dessous illustre, par le biais d'un extrait des enregistrements vidéo, le développement sphérique d'une boule de feu sur 1,5 ms, en aval de l'onde de choc aérienne.



Figure C1 Extraction vidéo – développement de la boule de feu des produits de détonation d'un explosif secondaire

B. Protocoles expérimentaux

On détaille tout d'abord le protocole expérimental générique des expérimentations :

B.1 Expérimentations à Grande Echelle

La charge explosive de l'ordre de 1 à 2 kg est placée à 4 mètres de hauteur à l'aide d'une potence et d'un filet fin de maintien. La charge est amorcée en son centre par une amorce à fil explosé de type RISI RP80, mise en place au travers un puits d'amorçage usiné dans la masse.

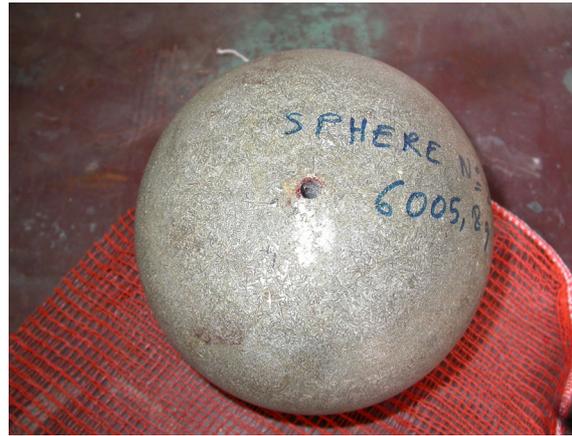


Figure C2 Gauche : Mise en place de la sphère d'explosif – Droite : sphère usinée et son puits d'amorçage

Pour les explosifs à faible diamètre critique tels que les explosifs comprimés à base de HMX, l'amorçage s'effectue de manière directe et ne nécessite pas la mise en place d'un booster en V401. Par contre, pour les explosifs plus difficilement amorçables, l'édifice pyrotechnique est constitué d'un booster sphérique en son centre, entouré par la charge principale. Typiquement, le diamètre total de la sphère est de l'ordre de 90 mm pour un booster central de diamètre 30 mm. Pour comparer les effets aérobies des explosifs condensés, on réalise plusieurs types de tir en conservant d'une part la masse initiale d'explosif (iso M), le rayon initial de la charge (iso Ro), ou bien encore en tentant d'égaliser les énergies chimiques a priori libérables par l'explosif (iso E).

Une sonde à ionisation placée sur la surface de la charge permet un recalage temporel de l'ensemble des signaux de mesure et des enregistrements par rapport au moment où l'onde de détonation débouche à la surface de l'explosif.

Deux types de diagnostics sont utilisés :

- Les diagnostics ponctuels par mesure de surpression,
- Les diagnostics globaux par visualisation numérique rapide, dans le spectre visible ou dans l'infrarouge.

La hauteur initiale de la charge (HOB comme « Height Of Burst»), et la disposition des capteurs permettent de ne capturer que l'onde aérienne incidente et de s'affranchir de tout problème lié à la réverbération des chocs sur le sol ou les structures voisines.

B.2 Capteurs de surpression

Les capteurs utilisés ici sont des capteurs piézoélectriques PCB, de type 113Axx selon la gamme de mesure employée. Les capteurs sont montés de manière affleurant sur des sondes « stylo » dont le design a été amélioré dans le cadre de cette étude afin d'éviter les perturbations mécaniques et électromagnétiques des mesures. La partie sensible du capteur est protégée contre le rayonnement par une fine couche de graisse.

Les performances affichées par le constructeur sont identiques à celles fournies en annexe B – expérimentations en milieu clos. A nouveau, un passage préliminaire en tube à choc permet de connaître de manière précise la fonction de transfert du deuxième ordre (amortie) de la chaîne de mesure. Les capteurs retenus démontrent une excellente reproductibilité des mesures comme le montre la figure C4, aux incertitudes près liées aux positionnements initiaux relatifs des différents éléments (charge, capteurs) et du temps de fonctionnement de la ligne de mise de feu. Ces capteurs démontrent également leur aptitude à capturer les fronts de choc, même si en champ proche de la charge (à 1 mètre), le temps de montée du capteur, de l'ordre de 1 μ s, ne permet pas une mesure correcte du niveau maximal de pression.



Figure C3 Sonde « stylo » à 1 mètre de la charge

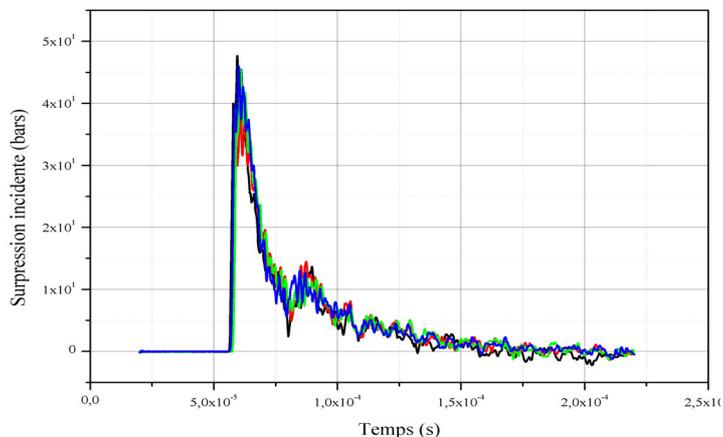


Figure C4 Reproductibilité sur 3 tirs des signaux de surpression – charge de HMX

Les sondes sont placées à des distances respectives de 1, 1,5, 2, 3, 4 et 5 mètres du centre de la charge. La configuration sphérique de l'expérimentation permet de disposer d'un large espace de travail et de disposer les mâts de mesure afin de ne pas perturber l'écoulement de l'air en aval de l'onde de choc aérienne.

Les fréquences d'échantillonnages sont supérieures aux fréquences caractéristiques de la chaîne de mesure afin d'éviter toute perte d'information. Selon la configuration de tir, le montage affiche une fréquence de résonance de l'ordre de 700 kHz. Un filtre numérique est appliqué aux signaux afin de supprimer les hautes fréquences, qui peuvent également être d'origine mécanique.

B.3 Système d'imagerie numérique ultra-rapide dans le spectre visible

On dispose à une distance de 30 mètres de la charge, 3 (ou 4) caméras vidéo numériques ultrarapides de type Photron Fastcam® (APX ou SA1), ayant une matrice couleur utile de 1024 par 1024 pixels, pour observer dans le spectre visible la propagation de l'onde de choc aérienne et le développement de la boule de feu (développement anaérobie puis réactions aérobies avec l'atmosphère ambiante)

Typiquement, la cadence d'acquisition est de l'ordre de 30 000 i/s, pour une résolution de 512 par 256 pixels. A 30 mètres, la taille du pixel est de 3 cm. On utilise plusieurs têtes optiques rigoureusement identiques afin de ne faire varier que le temps d'exposition (supérieur ou égal à 1 μ s) et l'obturation du système optique.

En faisant varier ces paramètres, il est notamment possible de déterminer le rayon réel de la boule de feu en expansion, ainsi que le temps caractéristique de combustion des produits de détonation en l'absence quasi-totale de mélange forcé par réflexions d'ondes.

De plus, la connaissance des fonctions de transfert des filtres numériques Rouge, Vert et Bleu doit permettre de réaliser une analyse pseudo couleur des images enregistrées.



Figure C5 Tête optique déportée dans sa casemate de protection pour visualisation de l'explosion

B.4 Pyrométrie non intrusive infrarouge 2 longueurs d'ondes

Les observations dans le spectre infrarouge s'effectuent grâce à une caméra Princeton, associée à un montage optique centré en germanium, permettant d'une part de réduire la taille de l'objet regardé, et d'autre part, de diviser cet objet réduit en deux images identiques (bi-lentille), comme le montre la figure C6.

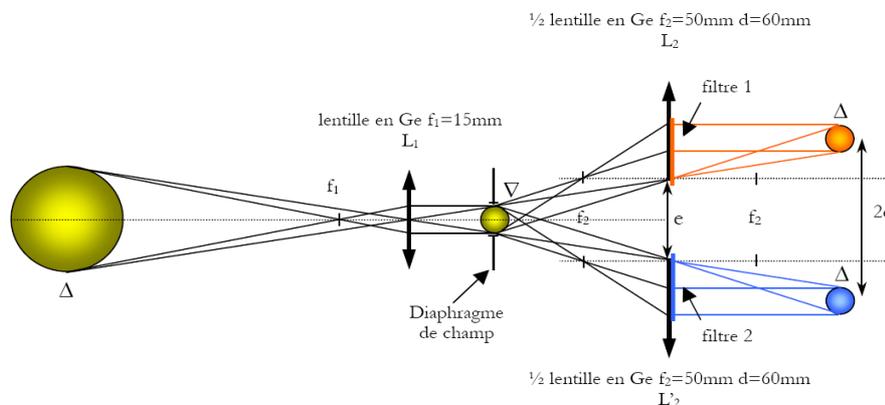


Figure C6 Montage optique associé à la caméra IR

En effet, afin d'estimer une température de surface de la boule de feu, on utilise ici le principe de la pyrométrie non intrusive à deux longueurs d'ondes. Les deux images obtenues sont filtrées respectivement à 4 et 4,7 μm (filtre passe bande étroite) et enregistrées en parallèle sur la matrice de capteurs de la caméra. Par une calibration sur corps noir (C.N. Mikron, allant jusqu'à 3500K) de l'ensemble de la chaîne de mesure et pour chaque capteur de la caméra, on détermine les fonctions de transfert K_i tel que le flux collecté en chaque point S' , à la longueur d'onde λ_i , peut se mettre sous la forme :

$$S'_{\lambda,T} = K_i \epsilon_i C_1 \lambda_i^{-5} \frac{1}{\exp\left(\frac{C_2}{\lambda_i T}\right) - 1} \quad (1)$$

$$R' = \frac{S'_{\lambda_2,T}}{S'_{\lambda_1,T}} \quad (2)$$

où C_1 et C_2 sont les constantes de la loi de Planck et ϵ_i , le facteur d'émission.

Après calibration spatiale, on « divise » pour chaque pixel constitutif, l'image filtrée à λ_1 par l'image filtrée à λ_2 : on calcule de manière automatique le rapport R' . En faisant l'hypothèse d'une émissivité ε constante sur la plage de longueurs d'ondes retenues, il est possible de calculer la valeur de T pour chaque point de la matrice.



Figure C7 Exemple de sous-images enregistrées dans l'IR

La mise au point de ce système de mesure non intrusif a fait l'objet d'une thèse de doctorat entre 2004 et 2008 – *Détermination optique de la température d'un volume de produits de détonation*, D. Ramel, Université Paris X.

Une autre étude théorique et expérimentale, menée en laboratoire, à l'aide d'une cellule de déflagration notamment, a permis de lever un certain nombre d'inconnues en ce qui concerne les propriétés optiques des produits de détonation d'un explosif condensé, riche en particules de carbone (Thèse de doctorat P. Vasseur, 2008, *Propriétés optiques des gaz : modélisation du rayonnement émis par un nuage de gaz et de particules en suspension*, Paris X, et Master Recherche 2, J. Legrand, 2008, *Etude de l'émission radiative de produits de détonation d'un explosif condensé*).

Ce moyen permet au final de dresser une cartographie d'une température de surface de la boule de feu en expansion, si l'on formule des hypothèses de type corps gris en ce qui concerne les gaz en combustion observés. Les résultats bibliographiques disponibles font état d'une profondeur optique des produits inférieure à 1 cm.

Cette hypothèse a été partiellement validée en réalisant des mesures intrusives et ponctuelles de la luminance rayonnée par les gaz sur 6 longueurs d'ondes entre 500 et 1510 nm (utilisation d'un pyromètre 6 voies du CEG). Les signaux de luminance obtenus sont en effet, pour les explosifs testés, cohérents entre eux : même évolution temporelle sur l'intervalle de mesure, mêmes niveaux de luminance (écarts relatifs deux à deux inférieurs à 10 %).

Le terme « température » doit être nuancé ici : il s'agit en fait d'une valeur moyenne de la température de surface de l'objet issue d'une double intégration en temps et en espace : la surface d'un pixel correspond en effet à une surface de 16 cm² environ au niveau de la boule de feu, et le temps d'intégration de la mesure est de 50 μ s.

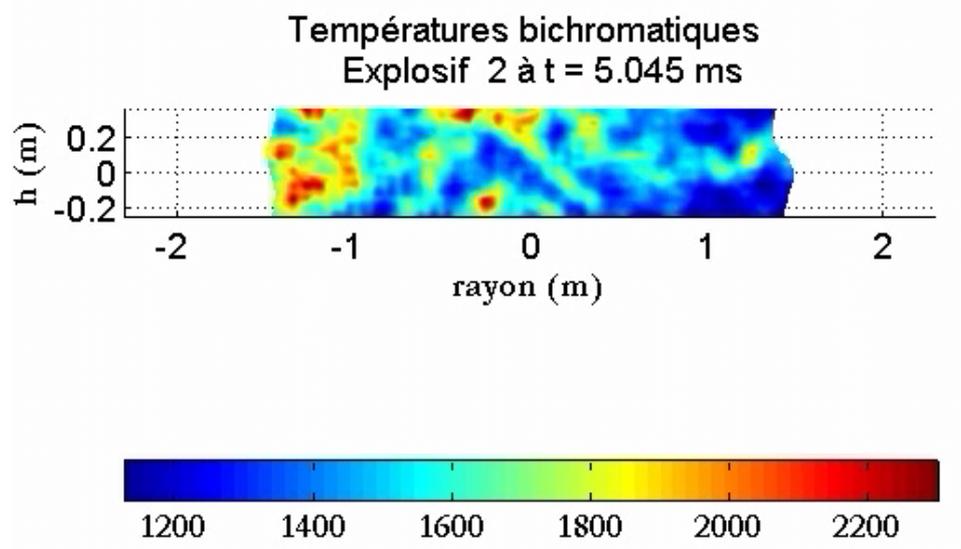


Figure C8 Cartographie de la température de surface calculée à t = 5,045 ms après la mise à feu de l'explosif

C. Expérimentations réalisées

Le tableau ci-dessous récapitule l'ensemble des expérimentations de détonation en champ libre réalisées ainsi que les moyens de mesure ou d'observation mis en œuvre. PE signifie petite échelle, GE grande échelle.

Expérimentations de détonation sphérique																						
Identification			Charge explosive principale					Booster			Amorçage		Instrumentations de l'expérience									
N°	Date	Type	Explosif	Masse [g]	Diamètre [mm]	Masse [g]	Diamètre [mm]	Masse [g]	Diamètre [mm]	Type	Point	Suppression	VNJR	IR 2 L	Fluimètres							
1	2006	DCL GE	V401	6030,5	183,6	/	/	/	/	RP80	Central	x	x									
2	2006	DCL GE	V401	5988,4	183,2	/	/	/	/	RP80	Central		x	x								
3	2006	DCL GE	Tritonal	5882,5	185,8	120	50	/	/	RP80	Central		x	x								
4	2006	DCL GE	Tritonal	5813,9	185,1	120	50	/	/	RP80	Central	x	x	x								
5	2007	DCL GE	Tritonal	1247	110,8	120	50	/	/	RP80	Central	x	x	x								
6	2007	DCL GE	Tritonal	1114,4	106,7	120	50	/	/	RP80	Central	x	x	x								
7	2006	DCL PE	V401	210	60	/	/	/	/	RP80	Central	x	x									
8	2006	DCL PE	V401	210	60	/	/	/	/	RP80	Central	x	x									
9	2006	DCL PE	V401	210	60	/	/	/	/	RP80	Central	x	x									
10	2006	DCL PE	V401	210	60	/	/	/	/	RP80	Central	x	x									
11	2006	DCL PE	V401	210	60	/	/	/	/	RP80	Central	x	x									
12	2005	DCL PE	V401	100	46,8	/	/	/	/	RP80	Central	x	x									
13	2005	DCL PE	V401	150	53,6	/	/	/	/	RP80	Central		x		x							
14	2007	DCL PE	V401	120	50	/	/	/	/	RP80	Central	x	x		x							
15	2007	DCL PE	TNT	178	60	7,8	20	/	/	RP80	Central	x	x		x							
16	2007	DCL PE	B2213	185	60	7,8	20	/	/	RP80	Central	x	x		x							
17	2007	DCL PE	HT165/35	194	60	7,8	20	/	/	RP80	Central	x	x		x							
18	2007	DCL PE	B2258	189	60	7,8	20	/	/	RP80	Central	x	x		x							
19	2007	DCL GE	V401	2000	127,1	/	/	/	/	RP80	Central	x	x	x								
20	2007	DCL GE	TNT	2692	150	119,4	50	/	/	RP80	Central	x	x	x								
21	2007	DCL GE	B2211	1555	120	60,2	40	/	/	RP80	Central	x	x	x								
22	2007	DCL GE	B2258	1466	120	60,8	40	/	/	RP80	Central	x	x	x								
23	2008	DCL GE	TNT	2646	150	119	50	/	/	RP80	Central	x	x	x								

Tableau C1 – Expérimentations DCL 2006 - 2008

D. Résultats

On donne ici les principaux procédés de post-traitement et d'analyse des enregistrements.

D.1 Post-traitement des signaux de pression

L'ensemble des moyens de mesure sont déclenchés de manière synchrone sur l'ordre de mise de feu de la charge explosive. En particulier, les signaux de pression peuvent être recalés soit par rapport à ce top 0, soit par rapport au temps de débouché de l'onde de détonation à la surface de l'explosif, fourni par la sonde à ionisation.

On relève principalement dans cette étude le temps d'arrivée T_a du choc au niveau des différents capteurs afin de pouvoir tracer dans le plan (distance, temps) le diagramme de marche sphérique de l'onde aérienne. La figure C9 est un exemple de résultat pour le TNT (courbes violettes) et le V401 (courbes bleues).

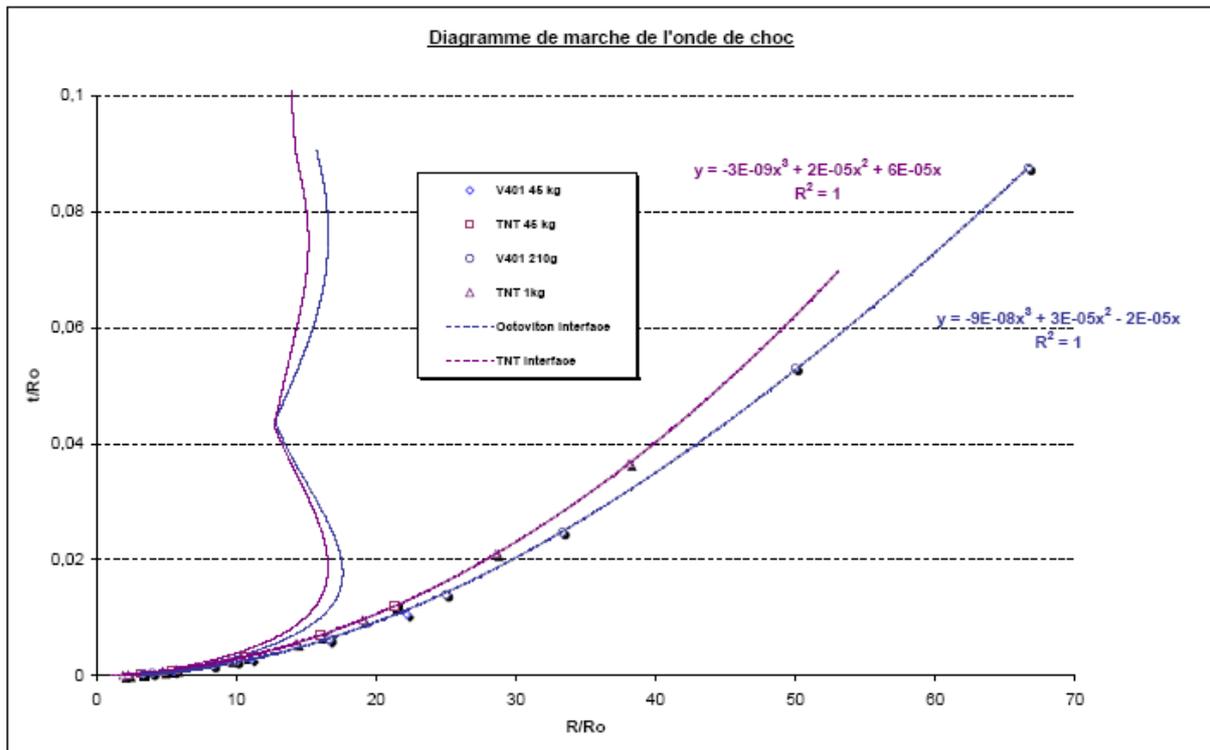


Figure C9 Diagrammes de marche expérimentaux du V401 et du TNT

Sur cette même figure, les valeurs sont adimensionnalisées (distance R/R_o ou R_o est le rayon initial de la charge) ou réduites (t/R_o , exprimé en s/m par exemple). Les traits pleins correspondent à la position de l'interface théorique entre les produits de détonation et l'air, position obtenue par résolution numérique (cas 1D sphérique, équation d'état de type JWL pour l'explosif, à palier d'énergie pour l'air). Le diagramme de marche met en évidence le comportement auto similaire de la propagation du choc, indépendant de la masse initiale de l'explosif.

D.2 Post-traitement des enregistrements vidéo

Comme pour les expérimentations DMC, les enregistrements vidéo du développement de la boule de feu constituent une base de données conséquente à exploiter. A nouveau, la mise au point d'un module de dépouillement automatisé permet d'effectuer des opérations mathématiques élémentaires sur les images sauvegardées au format .Tiff (codée sous 8 ou 10 bits).

Le premier type de traitement est une analyse pseudo-couleur des images en choisissant par exemple la couche Rouge des matrices. La visualisation sous une échelle logarithmique permet de mettre en évidence les phénomènes de turbulence en surface de boule de feu (taille des structures observées), ainsi que le contraste de luminance entre la scène de fond et le contour apparent de la sphère en expansion.

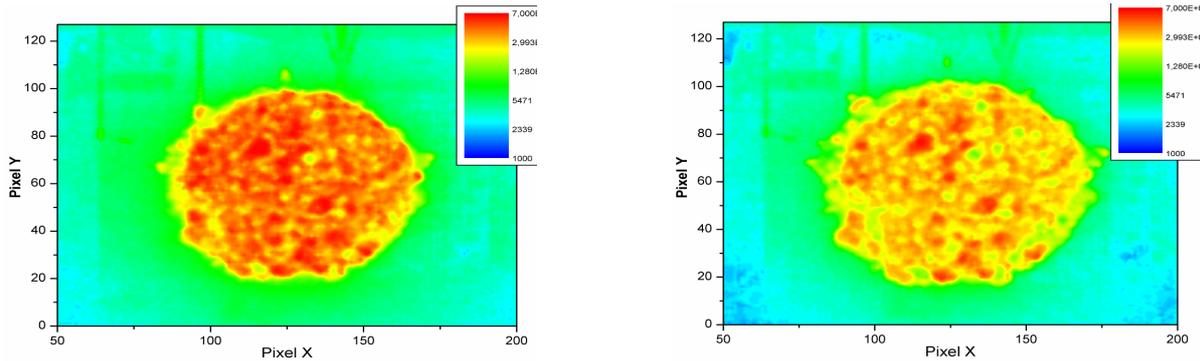


Figure C10 Analyse pseudo couleur d'une boule de feu à $t = 3$ ms et $t = 4$ ms après détonation de la charge explosive

Il est également aisé de déterminer (par soustraction, division ou détection de seuils) son rayon apparent en fonction du temps. La figure C11 présente l'interface permettant cette analyse automatique. En sortie, on obtient aussi les profils de luminance le long d'un diamètre ou d'une sous partie du phénomène. Ce traitement demande de transformer les données RGB en 65536 niveaux de gris.

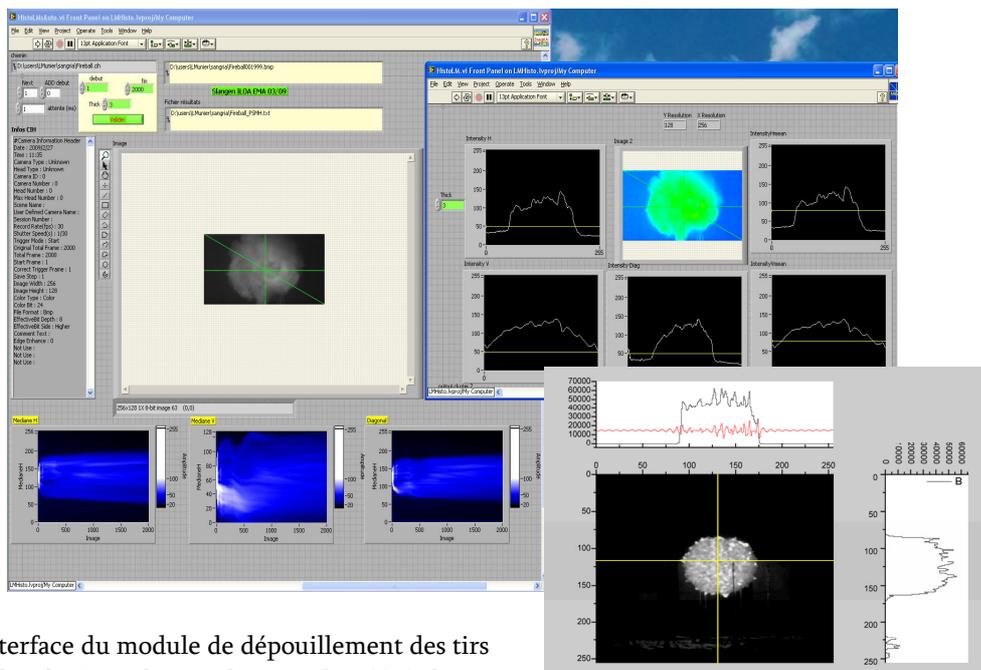


Figure C11 Interface du module de dépouillement des tirs DCL – A gauche, fenêtres de visualisation de $R(t)$, à droite Profils de luminance le long d'un diamètre.

Au final, il est possible de tracer dans le plan (distance, temps) l'évolution réelle de l'interface turbulente des produits de détonation de l'explosif. La figure ci-dessous montre les résultats obtenus pour le V401. On note que pour cet explosif, le rayon final (1^{ère} pulsation) atteint une valeur proche de 25 fois le rayon initial, effet que les modèles 1D sphériques sont incapables de reproduire.

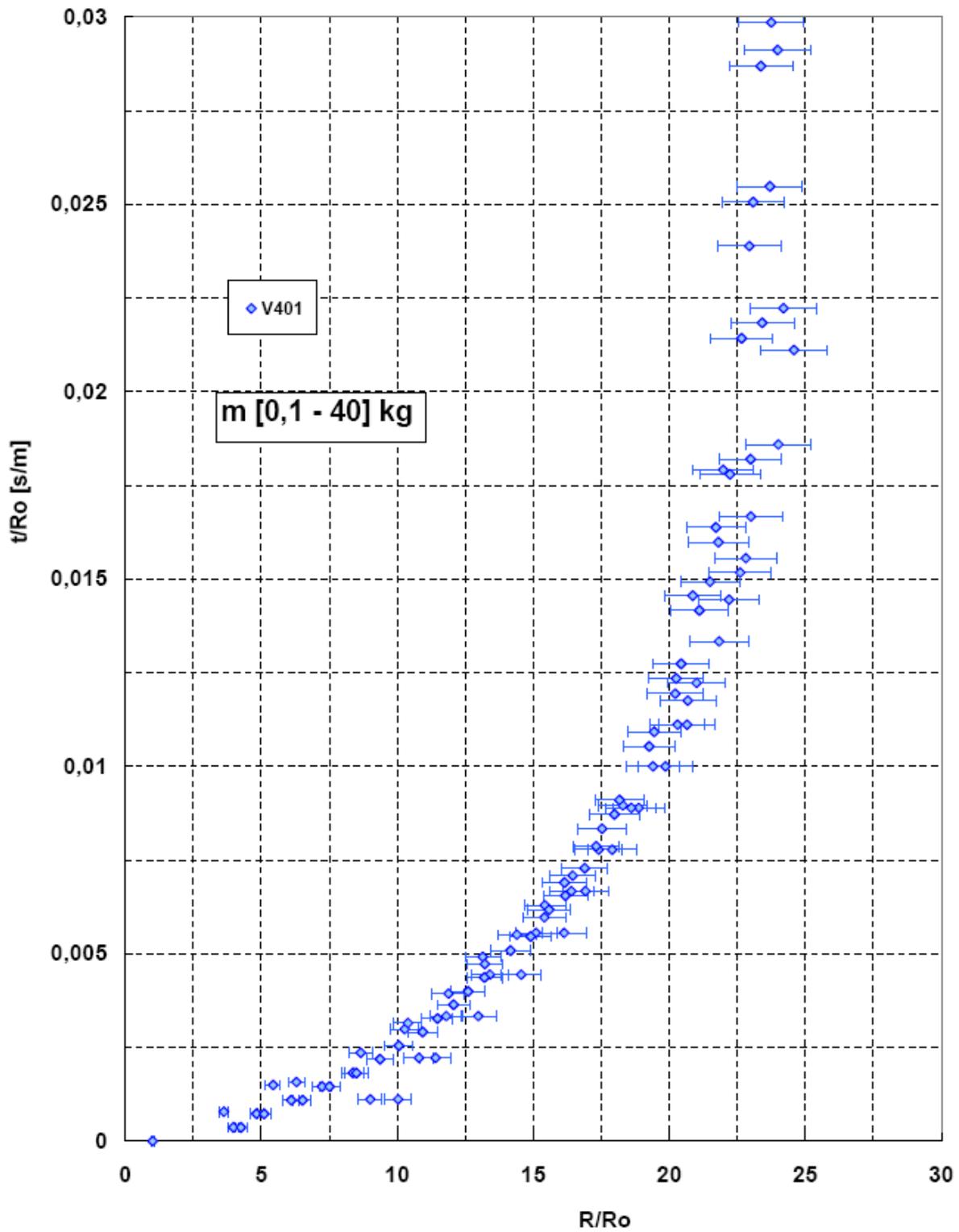


Figure C22 Rayon réduit mesuré de la boule de feu en fonction du temps réduit – V401

D.3 Effets « thermiques » ou de rayonnement

Outre les résultats des mesures par pyrométrie 2λ infrarouge, il est possible de caractériser le phénomène de combustion secondaire et de rayonnement des produits de détonation en déterminant un temps de « fonctionnement » dans le spectre visible, pour chaque explosif : on définit ce temps comme étant la durée des phénomènes de rayonnement visibles, ou plus exactement, compte tenu du type de caméra rapide employé, le temps pendant lequel le niveau moyen de luminance est supérieur à 10 % de la pleine échelle. Ceci se traduit concrètement par un niveau de gris moyen sur l'image supérieur ou égal à 6553.

Par exemple, dans le domaine visible, la boule de feu du TNT rayonne 2,3 fois plus longtemps que la boule de feu du V401, pour une même masse d'explosif.

E. Commentaires

Au total, 23 expérimentations ont été réalisées avec succès. Plusieurs types d'explosif ont été tirés : TNT, V401, HMX, Tritonal, B2238,.... Dans le cadre de cette étude, on relate principalement les conclusions relatives au TNT et au HMX (ou V401), explosifs servant de référence de par leurs comportements aérobies opposés.

En ce qui concerne la taille des objets (rayon final de la boule de feu), les résultats obtenus sont extrapolables à échelle 1 (échelle 1 de notre étude). Pour une sphère de 60 kg de TNT, le rayon initial de la charge est de l'ordre de 208 mm, le rayon final de l'ordre de 5 mètres.

En l'absence de tout obstacle, la combustion secondaire des prodets est pilotée par le comportement hydrodynamique turbulent des gaz en présence et pour les premiers instants, de la vitesse de croissance des instabilités en bordure de boule de feu. Si ce taux de croissance est lié à des données intrinsèques à l'explosif (la densité des prodets), et indépendant de la masse, il n'en est pas de même pour la combustion (puis le rayonnement) à plus long terme, une fois les dimensions de la boule de feu stabilisées. Les résultats obtenus ici à l'échelle de 1 kg, par exemple les temps caractéristiques de rayonnement, servent de référence et de comparaison a priori des pouvoirs « thermiques » des explosifs sélectionnés.

Nom du document : Mémoire Laurent Munier
Répertoire : V:\Critiques\Rapports\Mémoire\FINAL Rapporteur
Modèle : \\w-nas1-c\applidata\$\munierl\Microsoft\Modèles\Normal.dot
Titre :
Sujet :
Auteur : CEG
Mots clés :
Commentaires :
Date de création : 19/04/2011 09:40:00
N° de révision : 22
Dernier enregistr. le : 16/09/2011 11:24:00
Dernier enregistrement par : munierl
Temps total d'édition : 469 Minutes
Dernière impression sur : 16/09/2011 11:33:00
Tel qu'à la dernière impression
Nombre de pages : 316
Nombre de mots : 81 908 (approx.)
Nombre de caractères : 450 496 (approx.)