

UNIVERSITÉ D'ORLÉANS

ÉCOLE DOCTORALE
ENERGIE, MATERIAUX, SCIENCES DE LA TERRE ET DE L'UNIVERS
Institut de Combustion Aérothermique Réactivité et Environnement

THÈSE présentée par :

Ayan MOUSSE RAYALEH

Soutenue le : 29 avril 2024

Pour obtenir le grade de : **Docteur de l'Université d'Orléans**

Discipline/ Spécialité : CHIMIE

ETUDE DE L'IMPACT DE L'AJOUT DE PROMOTEURS D'OXYDATION D'HYDROCARBURES LOURDS

THÈSE dirigée par :

Mme CHAUMEIX Nabiha

Directrice de recherche, CNRS ICARE, Orléans

Co-dirigée par :

Mme de PERSIS Stéphanie

Maître de Conférences, Université d'Orléans

Encadrant par :

M. ABID Saïd

Maître de Conférences, Université d'Orléans

RAPPORTEURS :

Mme. LAMOUREUX Nathalie

Ingénieure de recherche, PC2A-Université de Lille

M. MEVEL Rémy

Professeur, Université Tsinghua, Chine

JURY :

M. ABID Saïd

Maître de Conférences, Université d'Orléans

M. CATOIRE Laurent

Professeur, Ensta Paris, Président du jury

Mme CHAUMEIX Nabiha

Directrice de recherche, CNRS ICARE, Orléans

Mme de PERSIS Stéphanie

Maître de Conférences, Université d'Orléans

Mme LAMOUREUX Nathalie

Ingénieure de recherche, PC2A-Université de Lille

M. MEVEL Rémy

Professeur, Université Tsinghua, Chine

Membre invité :

M. GOLDSMITH Franklin

Professeur, Université de Brown, Etats-Unis

Mme WOOLDRIDGE Margaret

Professeur, Université de Michigan, Etats-Unis

REMERCIEMENTS	5
RESUME.....	6
INTRODUCTION.....	7
CHAPITRE I – ETAT DE L’ART.....	10
1 CONTEXTE DE L’ETUDE	11
1.1 ENJEU DES MOTEURS A ONDES DE DETONATIONS PULSEES (PDE)	12
1.1.1 EVOLUTION DES MOTEURS A ONDES DE DETONATIONS	12
1.1.2 LES DIFFERENTS TYPES DE MOTEURS A ONDE DE DETONATIONS	13
1.1.3 PROPRIETES DE LA DEFLAGRATION TELLE QU’EMPLOYEE DANS LE DOMAINE DES TRANSPORTS.....	31
1.1.4 EVALUATION DES PERFORMANCES	32
1.1.5 PRESENTATION SUCCINCTE DES AVANTAGES ET INCONVENIENTS DU MOTEUR PDE.....	35
1.2 OBJECTIFS DE L’ETUDE	36
1.2.1 CHOIX DU PROPANE COMME CARBURANT	37
1.2.2 IPN (ISOPROPYL DE NITRATE) COMME PROMOTEUR.....	38
1.2.3 ETUDES ANTERIEURES PORTANT SUR L’UTILISATION DU PROPANE ET IPN DANS LE MOTEUR A DETONATION PULSE	40
2 MODES DE PROPAGATION : LA DEFLAGRATION	45
2.1 FLAMME LAMINAIRE : FLAMME DE PREMELANGE	46
2.1.1 VITESSE FONDAMENTALE DE FLAMME.....	46
2.1.2 ENERGIE D’ACTIVATION ET NOMBRE ZEL’DOVICH.....	51
2.1.3 EPAISSEUR D’UNE FLAMME LAMINAIRE	51
2.1.4 NOMBRE DE LEWIS.....	53
2.2 METHODES DE MESURE DE LA VITESSE FONDAMENTALE DE FLAMME	54
2.2.1 LA METHODE DE LA BOMBE SPHERIQUE.....	54
2.2.2 RESULTATS EXPERIMENTAUX ISSUS DE LA LITTERATURE SUR LA VITESSE DE FLAMME.....	59
3 MODES DE PROPAGATION : PHENOMENOLOGIE DE LA DETONATION	64

3.1	THEORIE DE CHAPMAN ET JOUGUET	64
3.2	THEORIE DE ZELDOVICH, VON NEUMANN ET DÖRING.....	67
3.3	LA STRUCTURE TRIDIMENSIONNELLE DE LA DETONATION	68
3.4	MODES D'INITIATION DE LA DETONATION DANS LES TUBES	70
4	TRANSITION DE LA DEFLAGRATION A LA DETONATION	71
4.1	INSTABILITES DE LA FLAMME	73
4.1.1	INSTABILITES HYDRODYNAMIQUES, DITES DE DARRIEUS-LANDAU :	73
4.1.2	INSTABILITES THERMO-DIFFUSIVES, DITE DE ZEL'DOVICH :	73
4.1.3	INSTABILITES DUE A L'ACCELERATION, DITE DE RAYLEIGH-TAYLOR :	74
4.1.4	INSTABILITES DE KELVIN-HELMOLTZ :	74
4.2	EFFET DES ONDES DE COMPRESSION SUR L'ACCELERATION DE FLAMME	75
4.2.1	FONCTION DES OBSTACLES DANS LA TDD.....	75
4.2.2	ETUDES ANTERIEURES PERTINENTES SUR LA DETONATION POUR LE PROPANE.....	78
	CONCLUSION.....	79
	CHAPITRE II – DISPOSITIFS EXPERIMENTAUX, METHODOLOGIES ET OUTILS NUMERIQUES.....	80
1	ETUDE DE LA PROPAGATION DES FLAMMES LAMINAIRES	81
1.1	DESCRIPTION DE LA BOMBE SPHERIQUE	81
1.2	PREPARATION DES MELANGES	83
1.3	SYSTEME D'ALLUMAGE	84
1.4	DIAGNOSTICS ASSOCIES	85
1.4.1	MESURE DE LA PRESSION DYNAMIQUE.....	85
1.4.2	VISUALISATION PAR LA TECHNIQUE DE STRIOSCOPIE (DITE METHODE « SCHLIEREN »).....	86
1.4.3	METHODES D'ANALYSE DES IMAGES SCHLIEREN	88
1.4.4	DETERMINATION DE LA VITESSE DE FLAMME LAMINAIRE A ETIREMENT NUL ET DE LA LONGUEUR DE MARKSTEIN	
	89	
2	ETUDE DES TRANSITIONS CHOC-DETONATION ET DEFLAGRATION-DETONATION.....	92
2.1	TUBE A CHOC	92

2.2	TUBE DE DETONATION	93
2.3	PREPARATION DES MELANGES REACTIFS	95
2.3.1	CALIBRAGE DES DEBITMETRES MASSIQUES	95
2.3.2	ANALYSES CHROMATOGRAPHIQUES	98
2.4	CONDITIONS EXPERIMENTALES	100
2.4	METHODOLOGIE	101
2.4.1	DETERMINATION DE LA CELERITE DE L'ONDE DE CHOC INCIDENTE	101
2.4.2	DETERMINATION DE LA TAILLE DE CELLULE PAR LA METHODE DES TRACES DE SUIE	104
3	<u>OUTILS DE CALCUL</u>	<u>106</u>
	<u>BILAN.....</u>	<u>109</u>
	<u>CHAPITRE III – PROPAGATION DES FLAMMES LAMINAIRES.....</u>	<u>110</u>
1	<u>ETUDE DES MELANGES PROPANE / AIR.....</u>	<u>111</u>
1.1	EVOLUTION DU RAYON EN FONCTION DU TEMPS	112
1.2	VITESSE DE FLAMME LAMINAIRE.....	113
2	<u>IMPACT DE L'AJOUT D'ISOPROPYLE DE NITRATE (IPN) DANS LE MELANGE A BASE DE PROPANE</u>	<u>117</u>
2.1	METHODE DE VALIDATION DES DONNEES EXPERIMENTALES.....	117
2.2	COMPARAISON ENTRE LA VITESSE DE FLAMME LAMINAIRE EXPERIMENTALE ET SIMULEE	120
3	<u>ETUDE DES MELANGES PROPENE/AIR.....</u>	<u>122</u>
4	<u>CALCUL DES PARAMETRES FONDAMENTAUX DE LA COMBUSTION.....</u>	<u>127</u>
4.1	EPAISSEUR DE LA FLAMME	127
4.2	NOMBRE ZEL'DOVICH, NOMBRE DE LEWIS EFFECTIF ET ENERGIE D'ACTIVATION	129
	<u>CONCLUSION.....</u>	<u>132</u>
	<u>CHAPITRE IV – ETUDE DE LA TRANSITION VERS LA DETONATION</u>	<u>133</u>

<u>1</u>	<u>RESULTATS DU TCD OBTENUS POUR LES MELANGES PROPANE/IPN</u>	<u>134</u>
<u>1.1</u>	<u>MESURE DE LA VITESSE DE L'ONDE.....</u>	<u>134</u>
<u>2</u>	<u>IDENTIFICATION DE LA TRANSITION DE L'ONDE DE CHOC A LA DETONATION.....</u>	<u>135</u>
<u>2.1</u>	<u>STRUCTURE CELLULAIRE : SENSIBILITE A LA DETONATION</u>	<u>140</u>
<u>3</u>	<u>RESULTATS TCD OBTENUS DANS LE CAS DE MELANGES PROPENE-DIOXYGENE-DIAZOTE.....</u>	<u>142</u>
	<u>CONCLUSION.....</u>	<u>145</u>
<u>4</u>	<u>CONCLUSIONS ET PERSPECTIVES</u>	<u>146</u>
	<u>REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES.....</u>	<u>151</u>

Remerciements

Je tiens à adresser mes plus sincères remerciements à ma directrice de thèse, Nabiha Chaumeix, pour m'avoir accueillie au sein de son équipe de recherche « Cinétique et dynamique des systèmes énergétiques », pour la confiance qu'elle m'a accordée, ainsi que pour ses précieux enseignements tant sur le plan scientifique qu'humain. Grâce à elle, j'ai eu l'opportunité de participer à de nombreuses conférences à travers le monde, ce qui a enrichi mon expérience de manière inestimable.

Je remercie chaleureusement ma co-directrice Stéphanie de Persis, qui m'a fait confiance dès mes débuts en tant qu'étudiante de master. Ses conseils avisés et sa supervision rigoureuse ont joué un rôle essentiel tout au long de ce parcours.

Je tiens également à exprimer ma profonde gratitude à mon encadrant Saïd Abid, qui m'a transmis tout le savoir nécessaire sur le fonctionnement et l'utilisation du tube à choc. Ses outils développés pour le traitement des données ont été essentiels tout au long de ma thèse. Ses conseils avisés et nos discussions enrichissantes ont grandement contribué à l'avancement de mes travaux de recherche.

Je remercie sincèrement M. Mével et Mme Lamoureux d'avoir accepté de rapporter ma thèse, ainsi que M. Catoire d'avoir présidé mon jury. Mes remerciements vont aussi à Mme Wooldridge, qui a participé à ma soutenance depuis le Michigan par visioconférence, et à M. Goldsmith, qui a fait le déplacement depuis Rhode Island, États-Unis, pour être présent à cet événement marquant.

Une thèse expérimentale ne pourrait voir le jour sans le soutien d'une équipe technique compétente. Je tiens à exprimer une reconnaissance particulière à Mahmoud Idir, expert en systèmes laser, pour son aide précieuse avec l'optique, ainsi qu'à Fabrice Peyroux et Stéphane Delacenserie pour leurs conseils avisés en électronique et en mécanique, respectivement.

Je profite également de l'occasion pour remercier chaleureusement l'ensemble du personnel du laboratoire ICARE avec qui j'ai eu le plaisir de collaborer pendant ces années. Un grand merci à l'équipe administrative – Isabelle, Vincent et Valérie – pour leur soutien infaillible.

Un remerciement tout spécial aux jeunes du laboratoire avec qui j'ai partagé de nombreux moments agréables au fil des ans : Kouamé, Sharath, Leticia, Alaa, Fabian, les deux Hajar, Lydia, et bien d'autres encore.

Enfin, cette thèse n'aurait jamais pu aboutir sans le soutien indéfectible de mes proches. Je tiens à exprimer ma profonde reconnaissance à mon mari Youssouf, à mes parents, à ma famille ainsi qu'à mes amies Fardoussa, Asma, Zahra, Zeinab, Kadira, et à Saada et sa famille pour leur présence bienveillante et leur soutien tout au long de ce parcours.

Merci à toutes et à tous !

Résumé

ETUDE DE L'IMPACT DE L'AJOUT DE PROMOTEURS D'OXYDATION D'HYDROCARBURES LOURDS

Les développements de la technologie des moteurs à détonation pulsée (PDE : pulsed detonation engine) ont considérablement augmenté au cours des dernières années en raison des applications viables de la technologie dans les systèmes de propulsion, la production d'énergie et d'autres systèmes d'ingénierie. De nombreuses études expérimentales, numériques et théoriques ont été menées ou sont en cours pour comprendre comment cette technologie peut être mise en œuvre dans des systèmes de propulsion pratiques. La réalisation d'un système de propulsion PDE réussi dépend de l'amélioration de sa capacité à fonctionner dans des conditions de température et de pression extrêmes inhérentes à des fréquences de tir élevées, tout en utilisant des systèmes d'allumage robustes et en atteignant une taille physique relative raisonnable. Atteindre des détonations répétitives et cohérentes pendant des durées significatives reste un obstacle majeur pour tout système PDE actuel, en raison de la pression et de la charge thermique très instables. De plus, pour accomplir le TDD (transition-déflagration-détonation) dans une longueur de tube de détonation physique réalisable (par rapport à son diamètre) met encore plus de contraintes d'ingénierie sur l'optimisation des systèmes PDE.

Il existe actuellement plusieurs façons conceptuelles d'obtenir des détonations dans les systèmes PDE, qui peuvent être globalement classées en trois types : premièrement, l'utilisation de sources à haute énergie pour faire exploser les mélanges combustible-comburant directement avec divers moyens tels que des décharges d'arc à haute énergie, lasers, explosifs, etc. On pense que les décharges d'arc confèrent plus d'énergie au mélange gazeux que les systèmes d'allumage par étincelle conventionnels, dans le but d'induire rapidement le TDD. Cependant, cela n'est pas efficace et les circuits associés sont lourds et encombrants. Deuxièmement, un système hybride où à deux étages dans lequel une quantité initiale plus faible de mélange carburant-comburant peut être utilisée pour créer un jet turbulent chaud qui se poursuit dans une autre chambre remplie du mélange carburant-comburant principal pour créer des détonations. Enfin, des sources d'allumage à faible énergie sont utilisées en conjonction avec un mécanisme d'amélioration du TDD tel que des spirales, des rainures et des obstacles le long du chemin de déflagration.

Cette thèse présente des études fondamentales sur les propriétés chimiques et physiques de trois carburants d'intérêt pour les secteurs de l'énergie et de la propulsion avancés. Les études s'appuient sur des méthodes expérimentales novatrices pour combler les lacunes dans la connaissance de la chimie ou de la dynamique des gaz de chaque carburant. La première partie de l'étude se concentre sur la détermination des paramètres fondamentaux de la combustion du propane /air, propane-IPN (iso-propyle de nitrate) /air, IPN/air et propène /air. Les flammes sphériques en expansion ont été étudiées dans une bombe sphérique sur un large gamme de rapport d'équivalence pour deux températures et une pression. Ces mesures ont tout d'abord été effectuées à température ambiante (300 K). En effet, c'est à la température ambiante que la mesure est la plus facile à mettre en place et que les données de la littérature sont les plus abondantes pour les valider. Cette validation est nécessaire avant de pouvoir envisager une montée en température puis en pression par la suite.

La deuxième partie se concentre sur le phénomène de la détonation et de ses propriétés intrinsèques des mêmes mélanges. Pour réaliser les travaux, un tube à choc de deux configurations (TCD : Transition-Choc-Détonation ; TDD : transition-déflagration-détonation) ont été adoptés afin de réduire la distance et le temps de transition.

En conclusion, ce projet de recherche vise à étudier l'effet sensibilisant obtenu par l'ajout d'IPN sur le propane en présence de O₂ et la dilution à N₂ dans le cadre d'applications (PDE).

Mots clés : PDE, détonation, flamme laminaire, propane, IPN

ASSESSMENT OF CHEMICAL IMPROVERS FOR THE OXIDATION OF THE HEAVY FUELS

The developments in Pulse Detonation Engine (PDE) technology have seen a significant increase in recent years due to its viable applications in propulsion systems, power generation, and other engineering systems. Numerous experimental, numerical, and theoretical studies have been conducted or are ongoing to understand how this technology can be implemented in practical propulsion systems. The successful realization of a PDE propulsion system depends on improving its ability to operate under extreme temperature and pressure conditions inherent in high-frequency firing, while using robust ignition systems and achieving reasonable physical size. Achieving repetitive and coherent detonations over significant durations remains a major challenge for any current PDE system due to highly unstable pressure and thermal loads. Furthermore, accomplishing the Transition from Deflagration to Detonation (DDT) within a physically feasible detonation tube length (relative to its diameter) places further engineering constraints on PDE system optimization.

Currently, there are several conceptual ways to achieve detonations in PDE systems, broadly classified into three types. First, the use of high-energy sources to ignite the fuel-air mixtures directly with various means such as high-energy arc discharges, lasers, explosives, etc. High-energy arc discharges are believed to impart more energy to the gaseous mixture than conventional spark ignition systems, with the aim of rapidly inducing DDT. However, this method is not efficient, and the associated circuits are bulky and cumbersome. Second, a hybrid or two-stage system in which an initially smaller quantity of fuel-air mixture is used to create a hot turbulent jet that continues into another chamber filled with the main fuel-air mixture to create detonations. Finally, low-energy ignition sources are used in conjunction with a TDD enhancement mechanism, such as spirals, grooves, and obstacles along the deflagration path.

This thesis presents fundamental studies on the chemical and physical properties of three fuels of interest for advanced energy and propulsion sectors. The studies rely on innovative experimental methods to fill gaps in the understanding of the chemistry and gas dynamics of each fuel. The first part of the study focuses on determining the fundamental combustion parameters of propane/air, propane-IPN (isopropyl nitrate) /air, IPN/air, and propylene/air. Expanding spherical flames were studied in a spherical bomb over a wide range of equivalence ratios for two temperatures and one pressure. These measurements were initially carried out at room temperature (300 K) because it is the easiest temperature to work with and has the most abundant literature data for validation. This validation is necessary before considering temperature and pressure increases in the future.

The second part concentrates on the phenomenon of detonation and its intrinsic properties in these same mixtures. To conduct this work, a shock tube with two configurations (Transition-Shock-Detonation and Transition Deflagration to Detonation) was adopted to reduce the transition distance and time.

In conclusion, this research project aims to study the sensitizing effect achieved by adding IPN to propane in the presence of O₂ and dilution with N₂, within the scope of PDE applications.

Keywords: PDE, detonation, laminar flame, propane, IPN

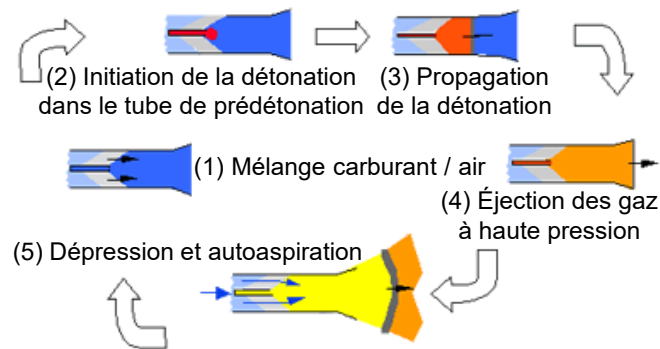


ICARE-CNRS, 1c avenue de la
recherche scientifique, 45071 Orléans



Introduction

Le moteur à ondes de détonation pulsées (PDE : Pulsed Detonation Engine) est un mode de propulsion par détonation, simple et efficace, utilisé dans le domaine aéronautique pour des vols à haute altitude, sub- ou supersoniques. Le fonctionnement du PDE repose sur la répétition relativement rapide d'un cycle de détonation présenté sur la figure suivante :



Les différentes phases du cycle PDE tiré de (IMBERT 2004).

Ce cycle est principalement composé de trois phases : la phase d'admission, de détonation et d'éjection des gaz brûlés. Le PDE se présente comme un tube fermé à une extrémité (appelé mur de poussée) et ouvert de l'autre sur l'atmosphère (côté tuyère) permettant d'éjecter les produits de combustion.

Les recherches sur ce type de moteur ont commencé depuis le début des années 1940 mais cette technologie est toujours en cours d'amélioration. Actuellement, il existe plusieurs dispositifs permettant d'obtenir des détonations dans les systèmes PDE :

- l'utilisation de sources à haute énergie pour initier directement la détonation des mélanges carburant-comburant avec divers moyens tels que des décharges d'arc à haute énergie, des lasers, des explosifs, etc.

- l'emploi de sources d'allumage à faible énergie couplé à un dispositif d'amélioration de la transition de la déflagration à la détonation (TDD) tel que des spirales, des rainures et des obstacles le long du chemin de déflagration.

- le recours à un système hybride ou à deux étages dans lequel une quantité initiale plus faible de mélange carburant-comburant peut être utilisée pour créer un jet turbulent chaud

qui se propage dans la chambre principale contenant le mélange carburant-comburant pour créer des détonations.

Les carburants typiquement utilisés sont des hydrocarbures lourds comme le kérosène et le JP-10. Toutefois, le contexte énergétique mondiale, en particulier l'épuisement des ressources fossiles et la nécessité de limiter les émissions de gaz à effet de serre et les émissions polluantes, conduit à évaluer d'autres solutions. Parmi les alternatives envisagées, l'utilisation d'un hydrocarbure léger apparaît comme une solution prometteuse mais son emploi nécessite l'ajout d'un promoteur stable afin d'améliorer ses propriétés de détonation. L'étude de l'impact de l'ajout des promoteurs d'oxydation représente actuellement un des verrous à l'utilisation des hydrocarbures légers que cette thèse intitulée « *Etude de l'impact de l'ajout de promoteurs d'oxydations d'hydrocarbures lourds* » se propose de lever. Ainsi, l'étude de l'oxydation d'un hydrocarbure représentatif d'un kérosène, le propane (C_3H_8), et de l'impact de l'ajout d'un additif pour accélérer la vitesse de libération de l'énergie afin de faciliter une transition rapide depuis un régime de déflagration vers celui de la détonation a été étudiée. Parmi les additifs envisagés, l'attention a été portée sur les composés gazeux de type nitrates d'alkyles, en particulier l'IsoPropyle de Nitrate (IPN). Cette étude, essentiellement expérimentale a porté sur l'acquisition de données fondamentales de combustion pour l'évaluation de l'efficacité des additifs en utilisant différents dispositifs expérimentaux développés à ICARE. Les paramètres ciblés ont été :

- Les vitesses de flamme laminaires dans une large gamme de températures et de pressions avec et sans additif par la méthode de la bombe sphérique ;
- Les paramètres de détonation et l'évaluation de la présence de l'additif.

Ainsi, ce manuscrit décrit les études fondamentales portant sur les détermination expérimentale et numérique des paramètres fondamentaux de combustion, d'une part, de mélanges propane/air et isopropyle de nitrate (IPN)/air, et d'autre part, de mélanges propane/IPN/air afin d'évaluer l'impact de l'ajout d'IPN. En outre, une étude complémentaire a été réalisée avec un autre hydrocarbure léger : le propène (C_3H_6) qui possède le même nombre d'atomes de carbone mais qui présente des propriétés d'auto-inflammation différente puisqu'il ne présente pas un coefficient négatif de température (CNT) comme le propane.

Le mémoire est composé de quatre chapitres.

Le premier chapitre expose l'état de l'art sur le sujet. Une attention particulière a été portée sur les enjeux liés à l'utilisation du PDE, le choix du carburant, les régimes de propagation de la combustion ainsi que le phénomène de la transition à la détonation (par choc et par déflagration) et de ses propriétés intrinsèques.

Le deuxième chapitre décrit les dispositifs expérimentaux, les méthodologies et les outils numériques utilisés dans cette étude : une bombe sphérique pour la flamme laminaire et un tube à choc à deux configurations pour étudier la Transition-Choc-Détonation (TCD) ou la Transition-Déflagration-Détonation (TDD) sont utilisés.

Le troisième chapitre présente l'étude de la propagation des flammes laminaires des mélanges propane/air, IPN/air, propène/air et l'influence de l'additif, l'isopropyle de nitrate (IPN) sur le mélange propane/air. Les résultats portent sur : (i) la mesure de la vitesse de flamme laminaire ; (ii) la mesure de la longueur de Markstein en fonction de la richesse du mélange ; (iii) la modélisation de l'épaisseur de flamme, l'énergie d'activation, le nombre de Zeldovich et le nombre de Lewis ; (iv) l'effet des instabilités sur la flamme pour les différents mélanges. Une étude paramétrique portant sur l'influence de chacun des quatre paramètres suivants : rapport d'équivalence, pression, température et l'effet de l'additif est également décrite.

Le quatrième chapitre présente l'influence de l'additif sur la sensibilité à la détonation des différents mélanges à base de propane et de propène par la méthode de la taille de la cellule de détonation. Les résultats rapportent la vitesse d'onde de détonation et les tailles de cellules mesurées dans les expériences de transition choc-détonation (TCD) utilisées pour déterminer les conditions critiques de pression et de température post-choc nécessaires pour initier une détonation. En outre, l'impact de l'ajout du promoteur, l'IPN, sur les conditions critiques est discuté dans le cas du propane.

Enfin, le manuscrit se termine par une conclusion et des perspectives d'études futures.

Chapitre I – Etat de l’art

Les thèmes explorés dans cette étude se concentrent sur l'analyse des méthodes d'initiation de la détonation dans les moteurs à détonation pulsée (Pulsed Detonation Engine, PDE). L'objectif de ce premier chapitre consiste à présenter le cadre de recherche de ce projet de thèse, articulé autour des enjeux liés à l'utilisation des moteurs à détonation pulsée.

La première section évoque le contexte et la justification de cette recherche tout en mettant en lumière les particularités du PDE ainsi que le choix du carburant. La deuxième partie aborde les différents modes de propagation, les paramètres essentiels de la combustion, ainsi que les instabilités observées dans les flammes. La troisième section traite du phénomène de la détonation de ses conditions d'initiation ainsi que de ses propriétés intrinsèques. Enfin, la dernière partie aborde la phénoménologie de la transition de la déflagration à la détonation.

1 Contexte de l'étude

Le respect des normes antipollution et les traités internationaux visant à lutter contre le changement climatique revêt une importance cruciale (Intergovernmental Panel on Climate Change et Edenhofer 2014) ; (Myles Allen 2019) pour la réduction des émissions de CO₂ dans les transports. Afin de répondre à cette exigence, le secteur industriel s'efforce de développer de nouveaux types de moteurs ou d'améliorer les performances des anciens, en mettant notamment l'accent sur les applications spatiales.

Les premières initiatives dans le domaine de la propulsion par détonation ont été lancées par Hoffmann (Hoffmann 1940), qui a introduit le concept du moteur à détonation pulsée (acronyme anglais PDE pour Pulse Detonation Engine).

Ces dernières années, la technologie des moteurs à détonation pulsée (PDE) a considérablement progressé en raison de leur pertinence dans les systèmes de la propulsion. De nombreuses études ont été menées, qu'elles soient expérimentales (Burr et Yu 2016) ; (Cooper et al. 2002) ; (Lee et al. 2004) ; (Lu, Meyers, et Wilson 2005) ; (Tangirala et al. 2005), numériques (Wang et al. 2022) ; (Li et Kailasanath 2001) ; (He et Karagozian 2003) ; ou théoriques (Wintenberger et al. 2003) ; pour parvenir à la mise en œuvre pratique de cette technologie. La réussite d'un système PDE dépend de sa capacité à fonctionner en continu

dans des conditions extrêmes de température et de pression, générées derrière les ondes de détonation intermittentes ou pulsées.

Le PDE représente un concept novateur en matière de la propulsion des engins volants à des vitesses subsoniques ou hypersoniques. L'évaluation des performances propulsives d'un PDE de section circulaire revêt un intérêt particulier pour comprendre et améliorer la conception du moteur dans un espace paramétrique englobant les caractéristiques géométriques, le type de carburant, la vitesse d'écoulement, la fréquence, le mode d'allumage, l'homogénéité du mélange et les échelles de temps du cycle du processus. De nombreuses recherches se sont concentrées sur l'estimation de la poussée générée par un PDE (Schauer, Stutrud et Bradley 2001) ; (Kiyanda et al. 2002) ; (Zitoun et Desbordes 1999) ; (Kailasanath 2003) ; , en se focalisant sur un modèle idéal de tube PDE, défini comme un tube à section constante, fermé à une extrémité, ouvert à l'autre extrémité, et uniformément rempli d'un mélange carburant-air au repos.

1.1 Enjeu des moteurs à ondes de détonations pulsées (PDE)

1.1.1 Evolution des moteurs à ondes de détonations

L'idée d'optimiser un cycle thermodynamique en privilégiant la combustion détonante plutôt que la déflagration a été initialement évoquée par Zel'dovich (Wintenberger et Shepherd 2006). Toutefois, la proposition concrète d'intégrer la détonation dans un système de propulsion a fait son apparition à l'Université du Michigan où Nicholls et al (Nicholls, Wilkinson, et Morrison 1957). ont conçu et réalisé avec succès le tout premier moteur à détonation pulsée, exploitant la détonation d'un mélange hydrogène-air pour générer une poussée (Nicholls, Wilkinson, et Morrison 1957). Adamson et son équipe ont également étudié, dans la même institution, la viabilité d'utiliser des ondes de détonation rotatives pour augmenter l'efficacité des systèmes de propulsion de fusées (Adamson Jr. et Olsson 1967) ; (Shen et Adamson 1973).

Parallèlement, de nombreux chercheurs ont examiné la possibilité d'appliquer la détonation continue aux systèmes de propulsion, que ce soit pour les statoréacteurs ou les moteurs de fusée (Dunlap, Brehm, et Nicholls 1958) ; (Sargent et Gross 1960) ; (Spindler, et al.

1962). Plus tard, des tentatives pour développer un système de propulsion à détonation continue ont été entreprises à l'Université du Michigan, mais elles n'ont pas abouti.

Suite à cette période, les recherches sur l'application de la détonation continue aux systèmes de propulsion ont été mises en veille pendant plusieurs années.

Dans les années 1980, l'équipe de chercheurs dirigée par Hertzberg (Hertzberg, Bruckner, et Bogdanoff 1988) à l'Université de Washington à Seattle a introduit une innovation majeure dans le domaine de la propulsion en proposant un concept révolutionnaire baptisé le "Ram Accelerator". Ce système novateur repose sur l'utilisation d'un tube rempli de mélanges détonables, au sein duquel un projectile est continuellement propulsé par les produits de combustion générés par le mouvement du projectile lui-même.

Au cours de cette même décennie, Eidelman et al. (Grossmann 1992) ont relancé les investigations sur les systèmes de propulsion par détonation pulsée (PDE), démontrant ainsi le potentiel d'amélioration de l'efficacité de la propulsion.

Il convient de noter que ce n'est qu'au début du XXI^e siècle que la recherche sur les systèmes de propulsion à détonation à rotation continue a connu un regain d'intérêt presque simultanément dans plusieurs pays, dont la Russie, la Pologne, la France, le Japon, les États-Unis, Singapour, la Chine, et d'autres encore.

Plus récemment, aux États-Unis, des programmes spéciaux tels que Vulcan-1 et Vulcan-2 ont été lancés pour explorer la possibilité d'intégrer des systèmes de combustion à volume constant dans la propulsion à réaction, en mettant particulièrement l'accent sur la technologie de propulsion par détonation.

Le paragraphe suivant s'attardera sur une analyse complète de l'ensemble des systèmes de propulsion basés sur la détonation, mettant en lumière les avancées et les développements dans le domaine de la propulsion spatiale.

1.1.2 Les différents types de moteurs à onde de détonations

Il existe plusieurs méthodes de mise en œuvre de la combustion détonative dans les systèmes de propulsion, chacune adaptée à des contextes spécifiques. Dans le domaine des moteurs, la détonation peut être stabilisée de différentes manières. Elle peut être maintenue

stationnaire par rapport au châssis du moteur, demeurer stationnaire ou quasi-stationnaire par rapport à un système de coordonnées en mouvement, ou encore être transitoire, avec des paramètres variant pendant le fonctionnement du moteur. De plus, elle peut adopter une nature pulsée.

L'application d'une détonation stationnaire est souvent liée au concept de moteur à onde de détonation stationnaire. En revanche, la propulsion par détonation quasi-stationnaire (stationnaire par rapport au référentiel rotatif) est associée au moteur de détonation rotatif (Rotating Detonation Engine : RDE), également connu sous le nom de moteur à ondes de détonation continue (Continuous Detonation Wave Engine : CDWE).

Dans le contexte des accélérateurs RAM (Ram Accelerators : RAMAC), la propulsion détonative peut prendre la forme d'un processus transitoire, que ce soit en mode superdétonatif ou en utilisant un tube de lancement garni d'explosifs en phase condensée. Dans ce cas, le projectile doit subir une accélération constante ; il est donc impératif d'ajuster avec précision les paramètres de détonation en fonction de la vitesse locale, garantissant ainsi une poussée continue.

Enfin, les moteurs à détonation pulsée (PDE) suivent un processus spécifique, accélérant la flamme jusqu'à la détonation dans des tubes spécialement conçus. La détonation est de courte durée et produit une poussée impulsive. Une fois les produits de combustion évacués du tube détonatif (tube de poussée), le tube est rechargé avec un mélange détonatif frais, permettant ainsi la relance de la détonation. Ce type de système peut fonctionner à une fréquence variant de quelques hertz à plusieurs dizaines de hertz.

Les moteurs basés sur la combustion détonative offrent des avantages significatifs par rapport aux moteurs conventionnels à déflagration. Ils se caractérisent par un taux de libération d'énergie plus élevé, une meilleure efficacité thermodynamique et une conception plus compacte de la chambre de dégagement de chaleur. Ces moteurs sont extrêmement polyvalents, adaptés à la propulsion d'aéronefs subsoniques, supersoniques et même d'engins spatiaux. De plus, la combustion détonative peut également être exploitée pour la propulsion transitoire dans les accélérateurs RAM. En termes d'impulsion spécifique I_{sp} , les moteurs à combustion détonative surpassent généralement leurs homologues à déflagration. Pour une meilleure compréhension, les chiffres présentés sur la Figure I-1 (Wolański 2013) comparent

les impulsions théoriquement prédites des moteurs PDE en fonction du nombre de Mach de vol avec celles des systèmes de propulsion conventionnels.

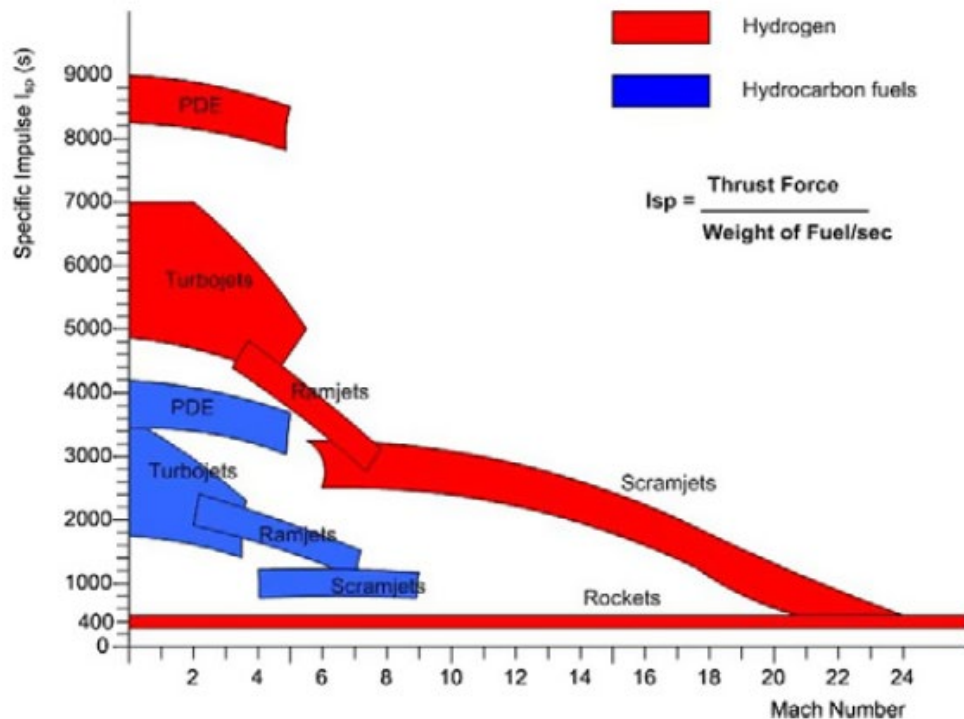


Figure I-1 : Dépendance théorique de l'impulsion spécifique I_{sp} au nombre de Mach de vol pour différents systèmes de propulsion et différents carburants, tiré de (Wolański 2013)

Tous les moteurs à détonations ont une impulsion spécifique nettement supérieure par rapport aux moteurs classiques. La Figure I-1 représente la I_{sp} théorique en fonction du nombre de mach des moteurs à base des hydrocarbures et de l'hydrogène. Comme on peut le constater, les moteurs ayant l'hydrogène comme carburant ont une I_{sp} bien plus élevée. Cependant, pour garantir un meilleur développement pour moteurs à détonations dans les applications de propulsion, l'utilisation d'un hydrocarbure liquide est nécessaire.

a) Moteurs à ondes de détonations stationnaires (Standing wave detonation engines, SWDE)

Le moteur à détonation stationnaire fonctionne de manière assez simple. Le carburant est introduit dans un flux supersonique et une onde de détonation s'est stabilisée à l'intérieur du moteur dans un coin ou par d'autres dispositifs qui peuvent être connectés. Ensuite, les produits de cette détonation sont expulsés à travers une buse. Un schéma typique du principe

de fonctionnement de ce moteur est illustré sur la Figure I-2 par le schéma tiré de (Dunlap, Brehm, et Nicholls 1958).

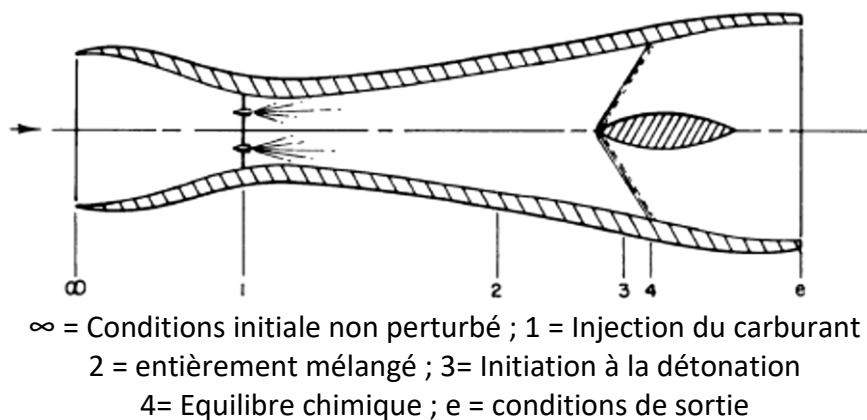


Figure I-2: Schéma illustrant le principe de fonctionnement initial du moteur à onde de détonation stationnaire, tiré de (Dunlap, Brehm, et Nicholls 1958)

L'origine de cette technologie remonte à une proposition initiale par Nicholls et son équipe à l'Université du Michigan (Dunlap, Brehm, et Nicholls 1958) ; (Nicholls 1958). Ils ont également exploré les applications potentielles de cette onde de détonation stabilisée dans un disque de Mach trop dilaté (trop grand) comme indiqué sur la Figure I-3 (Nicholls 1958).

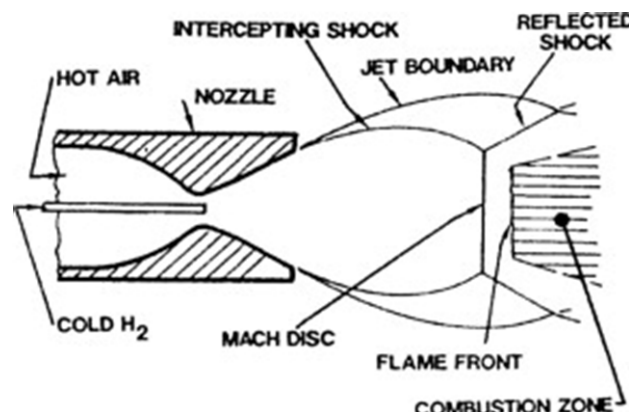


Figure I-3 : Schéma de principe d'une onde de détonation stationnaire à la sortie d'une tuyère, schéma tiré de (Nicholls 1958).

Par la suite, Dabora (Dabora 1994) a élargi ce concept pour créer le statoréacteur entraîné par détonation, également connu sous le nom de « *dramjets* » (voir Figure I-4 (Dabora 1994)). Cependant, il convient de noter que ces *dramjets* sont essentiellement des variantes du moteur à onde de détonation stationnaire, qui s'inscrivent dans la catégorie des moteurs à détonation stationnaire. La Figure I-5 tirée de (Wolański 2013) présente un schéma de ce moteur à onde de détonation oblique, qui est en réalité une version modifiée du SDWE avec une géométrie légèrement différente.

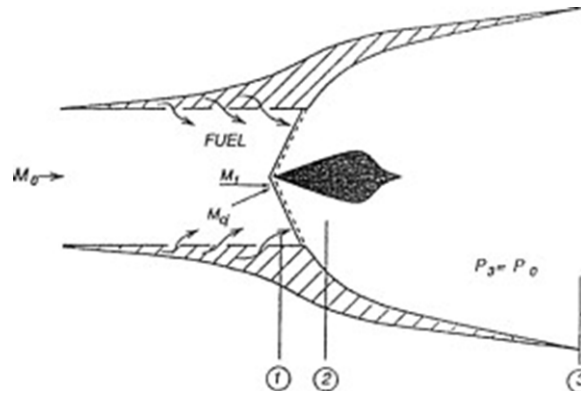


Figure I-4 : Schéma d'un statoréacteur entraîné par détonation (dramjet), tiré de (Dabora 1994)

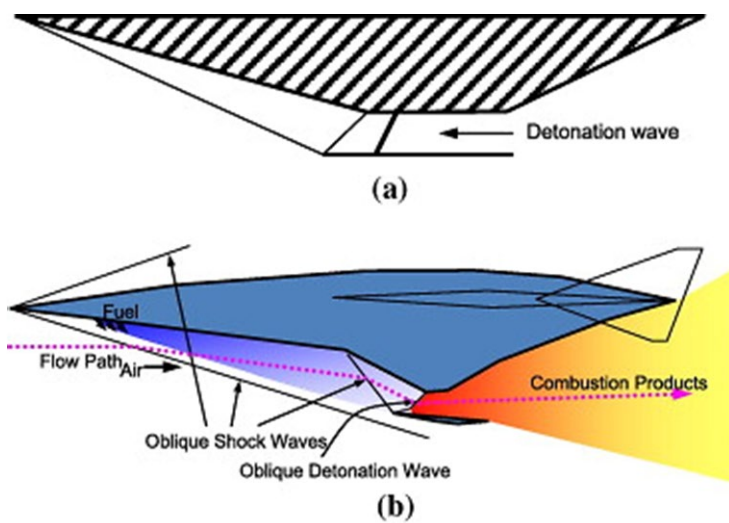


Figure I-5 : Vue schématique d'un statoréacteur supersonique avec (a) une onde de détonation oblique et (b) un tel moteur intégré dans un avion hypersonique, tirée de (Wolański 2013)

Ces moteurs font partie de la famille des statoréacteurs à combustion supersonique, également appelés « *scramjets* », qui remplacent la combustion supersonique par une onde de détonation oblique. Des modèles numériques ont déjà été créés pour évaluer la stabilité et les performances de ces moteurs (Jeung, Choi et Yoon 1998) ; (Adelman, Cambier et Menees 1990). Cependant, les résultats indiquent que cette configuration ne convient que pour une plage de vitesses de vol très limitée (Dabora 1994). En pratique, la vitesse de détonation CJ correspondante à la vitesse d'une onde de détonation plane, monodimensionnelle, représente la limite inférieure de fonctionnement du moteur, tandis que la limite supérieure se situe entre Mach 7 et 8 (Roy et Frolov 2010). Pour des nombres de Mach plus élevés, les forces aérodynamiques exercées sur un moteur doté d'une enveloppe extérieure conique génèrent plus de traînée que de poussée, ce qui restreint

considérablement les applications potentielles de ces moteurs, voire les rend presque inutilisables.

b) Accélérateur Ram

L'idée de l'accélérateur Ram, ou RAMAC, a été conceptualisée pour la première fois à la fin des années 1980 par un groupe de chercheurs de l'Université de Washington, sous la supervision d'A. Hertzberg (Bruckner et Hertzberg 1987) (NASA) ; (Hertzberg, Bruckner, et Bogdanoff 1988) ; (Hertzberg, Bruckner et Bogdanoff 1986). Ce concept repose sur l'accélération d'un projectile à l'intérieur d'un tube rempli d'un mélange carburant. Contrairement aux statoréacteurs conventionnels, le carburant n'est pas transporté à bord du projectile lui-même. Dans le RAMAC, le carburant et l'air (ou un autre comburant) sont préalablement introduits dans le tube, qui est relativement long, puis le projectile est injecté dans le tube à une vitesse supersonique.

La forme spécialement conçue du projectile ainsi que la composition du mélange permettent de comprimer et d'initier une détonation oblique dans une zone définie du projectile. Cela résulte en une augmentation de la pression et, par conséquent, en une poussée positive qui accélère le projectile. Le mode de propulsion varie en fonction de la vitesse du projectile : à des vitesses plus faibles, le flux d'air autour du projectile se comporte de manière similaire à un statoréacteur supersonique à combustion déflagrative, tandis qu'à des vitesses plus élevées, le système adopte le comportement d'un statoréacteur à combustion supersonique (*scramjet*).

Un schéma explicatif du fonctionnement du système RAMAC est présenté sur la Figure I-6 (Higgins 2006). Étant donné que l'initiation de la combustion (ou de la détonation) du mélange carburant dépend fortement de la composition du mélange, du nombre de Mach et de la forme du projectile, la composition du mélange à l'intérieur du tube doit être continuellement ajustée, car le projectile est constamment accéléré à l'intérieur du tube.

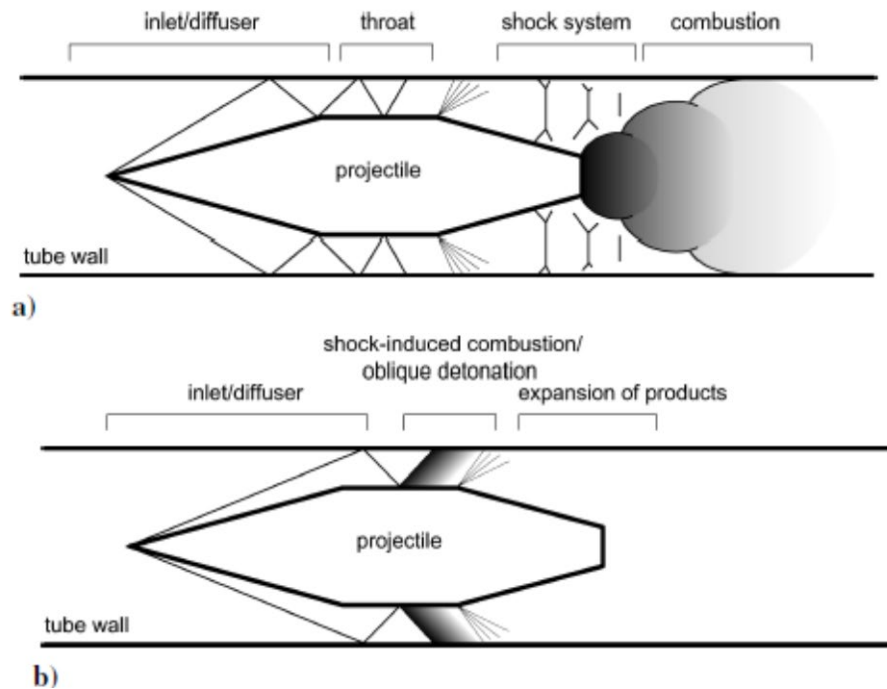


Figure I-6 : Diagramme schématique du fonctionnement de l'accélérateur Ram (a) en mode de combustion subsonique et (b) en mode de combustion dénotative, tiré de (Higgins 2006)

En combinant ces deux modes de propulsion différents, il serait possible d'accélérer le projectile d'une vitesse d'environ 600 m.s^{-1} jusqu'à environ 6000 à 8000 m.s^{-1} . Généralement, un canon conventionnel est utilisé pour l'accélération initiale du projectile. À des vitesses de projectile plus élevées, la détonation pourrait être initiée par le choc résultant (si le délai d'allumage de la détonation est trop court) ou par le mode d'étouffement thermique.

En raison de l'accélération continue du projectile à l'intérieur du tube, les conditions de production de la poussée propulsive évoluent constamment. Lorsque la vitesse du projectile est inférieure à la vitesse du son pour le mélange remplissant le tube, le retard d'allumage est généralement trop long pour initier la combustion derrière le deuxième choc oblique. Par conséquent, le corps central du projectile agit comme un accroche-flamme dans un mode classique de statoréacteur, et la combustion se produit au niveau ou au-delà de l'extrémité du projectile.

À l'origine, le concept du RAMAC a été envisagé dans le but de créer des systèmes facilitant le transport économique de matériaux vers l'orbite terrestre basse (Low Earth Orbit, LEO) ou pour mener des études sur les impacts à des vitesses hypersoniques. Pour concrétiser cette vision, il est impératif de poursuivre des recherches approfondies.

c) Moteur à détonation pulsée

Au cours des dernières décennies, les moteurs à détonation pulsée (PDE) ont suscité un intérêt croissant en matière de propulsion détonante. Ce vif intérêt a conduit au développement de divers types de PDE, ainsi qu'à leur application dans une multitude de contextes et à différentes échelles. Selon leur configuration, les PDE peuvent varier considérablement, allant des systèmes monotubes simples aux systèmes multitubes, avec ou sans soupapes mécaniques. Ils ont trouvé leur utilisation dans des applications diverses, notamment en tant que chambres de combustion pour les moteurs à turbine à gaz, les moteurs à double flux, et même dans la propulsion de fusées. De plus, la taille des PDE varie considérablement, allant des micro-moteurs aux systèmes de grande envergure conçus pour les turbines à gaz et les turboréacteurs. La diversité de types de PDE et de leurs applications témoignent de leur importance croissante dans le domaine de la propulsion.

Généralement composé d'un tube de longueur suffisante, le moteur à détonation pulsée (PDE) contient un mélange de carburant et de comburant frais, enflammé par une source d'énergie extrêmement puissante. L'objectif est d'initier une flamme qui, en un laps de temps relativement court, atteint la vitesse de détonation, permettant ainsi la transition rapide de la déflagration à la détonation sur une courte distance. Cette combustion détonative génère une pression élevée, convertie en poussée. Une fois que tout le carburant a été consommé par la détonation, les produits de combustion doivent être évacués du tube, et un nouveau mélange frais doit être introduit rapidement pour répéter le cycle.

Le PDE est capable de fonctionner sur une large plage de nombres de Mach, allant de l'immobilité jusqu'à Mach 4. Cependant, il fonctionne en mode pulsé, ce qui signifie que la poussée varie avec le temps et que la détonation doit être initiée à chaque cycle. La fréquence de fonctionnement typique d'un tel moteur est généralement d'environ une douzaine de Hertz. Le système est complexe car il nécessite des opérations de purge et de remplissage rapides. De plus, les PDE fonctionnent généralement dans des conditions stœchiométriques en raison de la nécessité d'une initiation rapide de la détonation, et leur fréquence est relativement basse. Si l'on envisageait d'appliquer la détonation pulsée aux chambres de combustion des turboréacteurs, il serait probablement nécessaire d'ajouter de l'air

supplémentaire pour abaisser la température avant d'atteindre la première étape de la turbine.

c-1) Déclenchement de la détonation

L'un des éléments essentiels pour assurer le fonctionnement réussi d'un PDE réside dans le déclenchement rapide et fiable de la détonation. Comme mentionné précédemment, la détonation peut être amorcée de deux manières : soit directement, soit à partir d'une déflagration initiée dans un tube, qui peut ensuite évoluer vers une détonation. L'amorçage direct de la détonation nécessite généralement une quantité significative d'énergie d'amorçage, ce qui rend plus pratique l'auto accélération d'une flamme pour déclencher la détonation. Dans ce dernier cas, l'énergie requise pour initier la combustion est très faible, ce qui permet l'utilisation de systèmes d'allumage de faible puissance.

Le processus d'auto accélération vers la détonation, connu sous le nom de transition de déflagration à détonation (TDD), a été largement étudié par de nombreux chercheurs, et des informations détaillées à ce sujet sont disponibles dans la littérature (Frolov 2008) (Ciccarelli et Dorofeev 2008) (Lee et al. 2004) (Oran et Gamezo 2007) Cependant, les images les plus précises de cette transition dans des mélanges gazeux ont été capturées par Oppenheim et ses collaborateurs (Urtiew et Oppenheim 1966). Ces images présentées sur la Figure I-7 (Urtiew et Oppenheim 1966) mettent en évidence de manière évidente des explosions locales auto-initiées, qui déclenchent la transition vers la détonation.

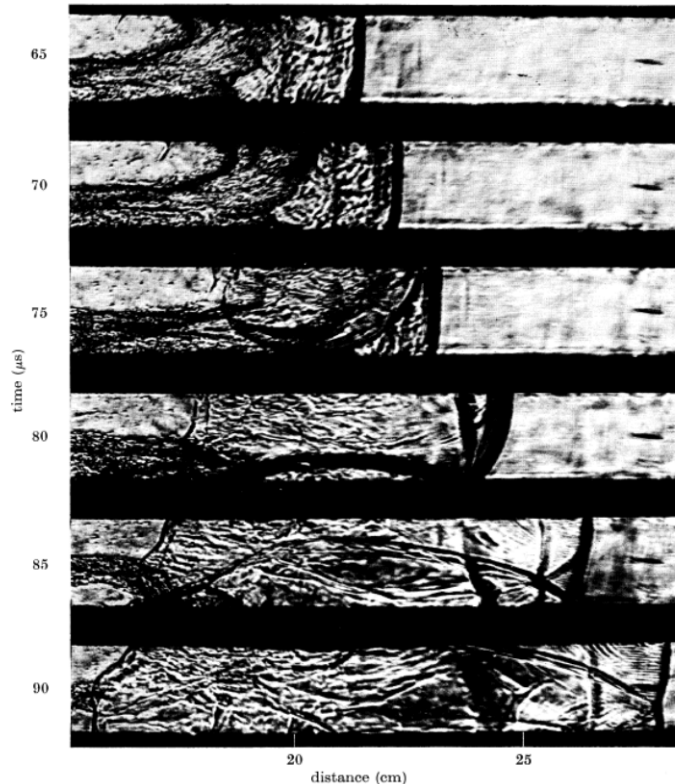


Figure I-7 : Images stroboscopiques laser Schlieren de la TDD dans l'hydrogène-oxygène, présentant ce que l'on appelle « l'explosion dans l'explosion », obtenues par Oppenheim tirées de (Urtiew et Oppenheim 1966)

Afin de favoriser une transition plus rapide vers la détonation au sein des tubes ou canaux, Shchelkin (Schelkin 1940) a avancé l'idée d'insérer une spirale dans le tube, ce qui accentue les turbulences engendrées par l'accélération de la flamme. Cette approche réduit considérablement la distance nécessaire pour atteindre la détonation. Une accélération encore plus significative vers la détonation peut être obtenue en disposant des obstacles dans le tube. La première étude approfondie de ce processus a été réalisée à l'Université de technologie de Varsovie (Wolanski et Wojcicki 1977). La Figure I-8 (Schelkin 1940) illustre clairement comment ces obstacles propulsent la flamme vers la détonation.

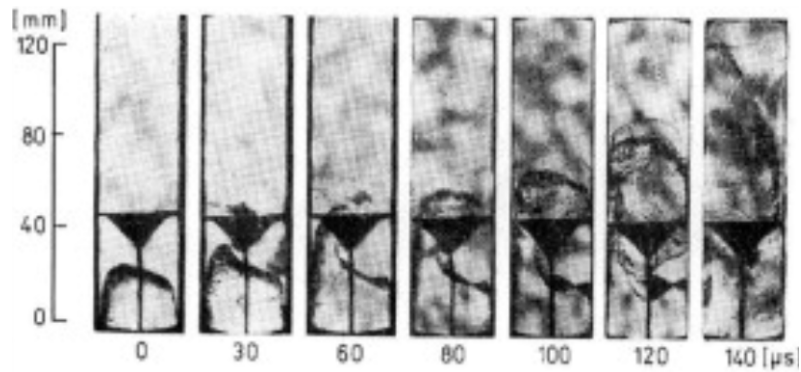


Figure I-8 : Images stroboscopiques Laser Schlieren montrant l'influence d'un obstacle sur l'accélération de la TDD dans un mélange oxy-acétylène tirées de (Schelkin 1940)

Depuis cette découverte, de nombreuses nouvelles recherches, à la fois expérimentales et numériques, ont été menées pour examiner l'impact des obstacles sur le processus d'accélération de la flamme vers la détonation.

c-2) PDE simple

La première tentative de développer un moteur à détonation pulsée (PDE) a été entreprise à l'Université du Michigan sous la direction de Nicholls et ses collaborateurs (Nicholls, Wilkinson, et Morrison 1957). La conception du moteur élaborée par l'équipe de l'Université du Michigan est présentée sur la Figure I-9.

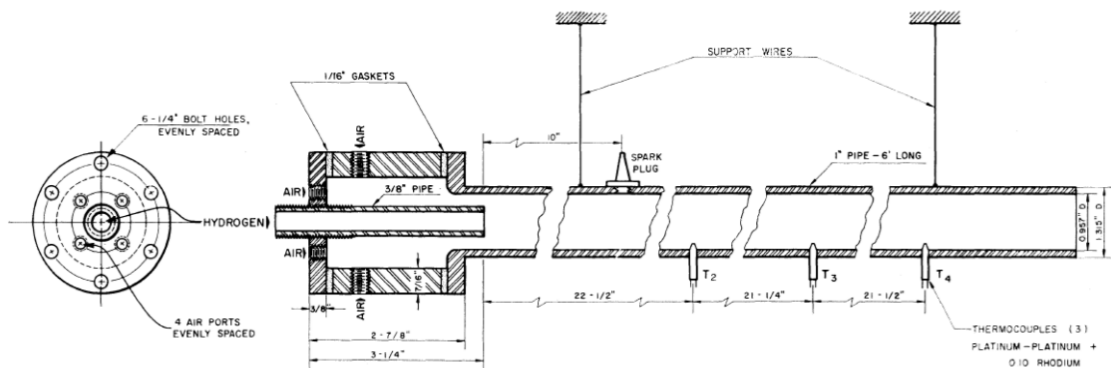


Figure I-9 : Premier PDE conçu par Nicholls et al. à l'Université du Michigan, schéma tiré de (Nicholls 1957).

Cependant, après cette phase initiale de recherche, les travaux ont été mis en veille pendant plus de deux décennies. À l'époque, l'efficacité énergétique n'était pas une préoccupation majeure, principalement en raison des prix très bas du pétrole brut, et par conséquent, du carburant utilisé dans l'aviation.

Ce n'est qu'au milieu des années 1980, lorsque les prix du pétrole brut ont connu une hausse significative, qu'Eidelman et son équipe (Eidelman, Grossmann, et Lottati 1991) ; (Grossmann 1992) ; (Eidelman, Grossmann, et Lottati 1990) ; ont relancé les recherches sur les PDE. Leur travail a montré qu'un système de ce type pourrait considérablement améliorer l'efficacité énergétique. Depuis cette période, l'intérêt pour la recherche sur les PDE n'a cessé de croître. Un effort de recherche substantiel a été déployé, et de nombreux articles ont été publiés, couvrant divers aspects de ces moteurs. On peut citer par exemple (Roy et al. 2004; Dean 2003; Kailasanath 2003; Schauer et al. 2005; Hoke, Bradley, et Schauer 2005; Grossmann 1992; Eidelman et Grossmann 1992)....

c-3) Principe de fonctionnement du PDE

Le fonctionnement du PDE peut être expliqué de manière simplifiée, comme illustré sur la Figure I-10 (Bussing et Pappas 1994).

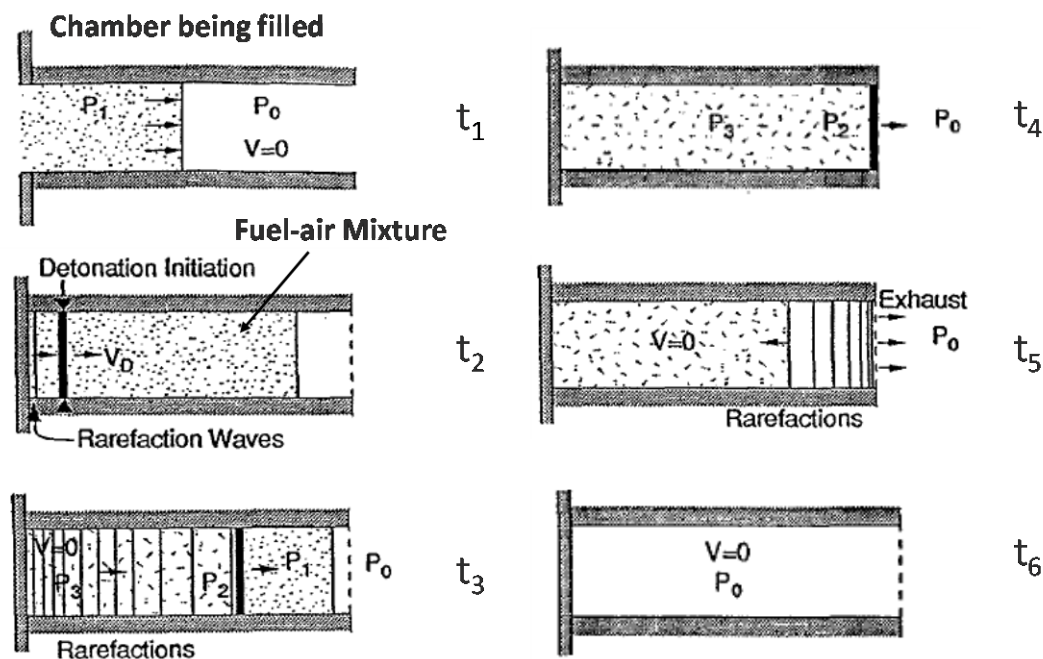


Figure I-10 : Principe de fonctionnement du PDE, schéma tiré de (Bussing et Pappas 1994)

D'après la Figure I-10, on voit que le cycle PDE commence par l'introduction d'un mélange frais dans le tube (t_1). Une fois qu'une quantité suffisante de ce mélange a été injectée, l'entrée du tube est fermée, et une détonation est initiée (t_2). À mesure que la détonation progresse à l'intérieur du tube, des ondes de raréfaction se forment, exerçant une pression sur la plaque de fermeture du tube, créant ainsi une force de poussée (t_3). Après un certain temps, la pression avant atteint l'extrémité du tube (t_4), ce qui déclenche l'éjection des produits de détonation (t_5). Cette éjection se poursuit jusqu'à ce que la plupart des produits aient quitté le tube, et que la pression retombe en dessous de celle de l'environnement extérieur (t_6), marquant ainsi la fin du cycle et permettant le démarrage d'un nouveau cycle.

En pratique, le processus est plus complexe et moins optimal. Le tube de détonation, utilisé comme tube de poussée, n'est pas entièrement rempli avec le mélange frais, ce qui entraîne un déclenchement de la détonation qui n'est pas instantané et nécessite un certain temps pour atteindre le TDD (Transition Déflagration Détonation). Après le TDD, le processus est similaire à ce qui a été décrit dans le cycle idéal, mais la pression générée et la vitesse de détonation sont inférieures à celles du cycle idéal. En outre, dans le cycle réel, l'évacuation du tube n'est pas parfaite, et lorsque le nouveau cycle démarre, certains produits du cycle précédent demeurent dans le tube, diluant ainsi le nouveau mélange. Par conséquent, l'onde de détonation produite est moins puissante que dans le cycle idéal.

En fonction de son application, le PDE peut varier considérablement en taille, allant de la petitesse d'une puce informatique à un système à grande échelle (à l'échelle d'une turbine à gaz ou turboréacteur). Ces PDE peuvent opérer sur une plage de fréquences s'étendant de 10 à 100 Hz et être alimentés par une variété de mélanges de carburant. La Figure I-11 montre des exemples de PDE, couvrant une gamme allant du microscopique au macroscopique. Il est à noter que, dans ce contexte, la régularité de la répétition de la pression au cours des cycles successifs peut parfois être sujette à des variations, comme illustré dans ces exemples.

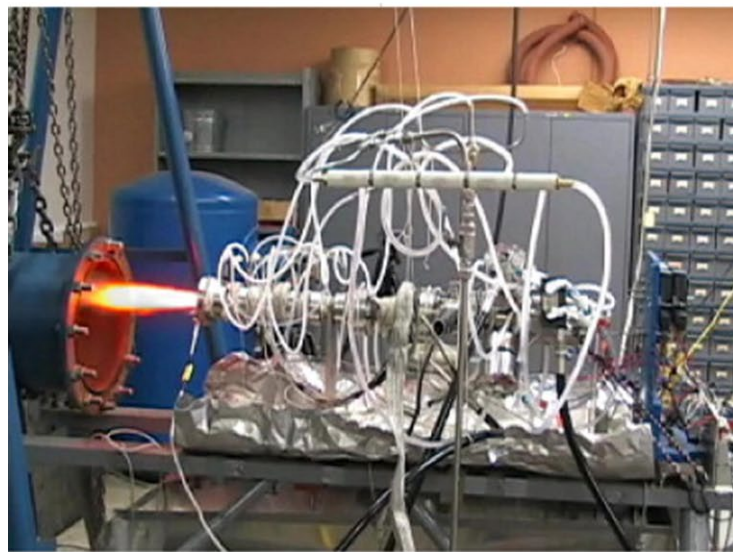
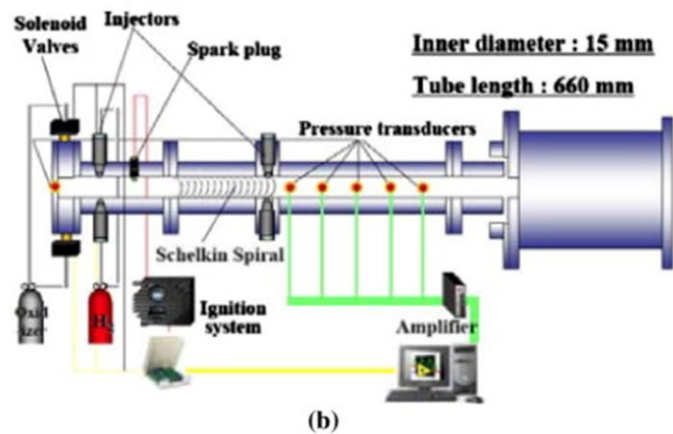
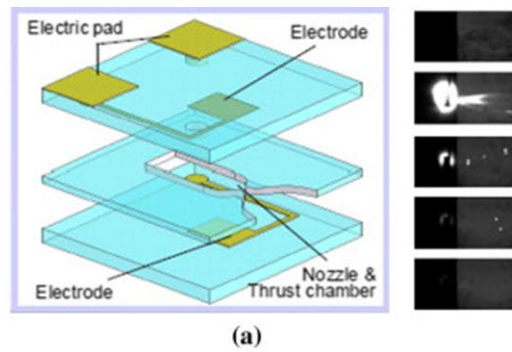


Figure I-11 : Variétés de moteurs à détonation pulsée : (a) Schéma du micro PDE et test du micro PDE pour le système de contrôle d'attitude des satellites (Lab Chip) ; (b) Installation d'essai pour le PDE de micro propulsion à l'Université Aoyama Gakuin et (c) photo d'un PDE en fonctionnement à l'Université du Texas à Arlington tirée de (Wolański 2013)

Les PDE ne se limitent pas à être utilisés uniquement dans les systèmes de propulsion, mais ils peuvent également être incorporés dans d'autres types de moteurs. En 1999, Remeev et al. ont décrit le développement d'un statoréacteur équipé d'une chambre de poussée à détonation pulsée (Remeev, et al. 2001). Un schéma illustratif de ce système est présenté sur la Figure I-12.

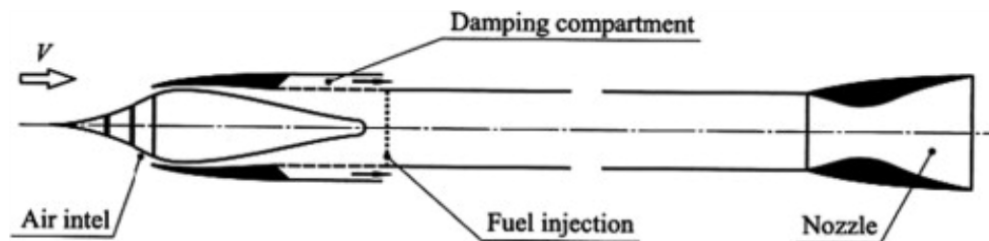


Figure I-12 : Schéma du concept d'un PDE mono-chambre tiré de (Wolański 2013)

Les recherches menées ont principalement porté sur la modélisation, à la fois expérimentale et numérique, de l'amorçage de la détonation, ainsi que sur les dispositifs d'amortissement installés en aval du diffuseur du statoréacteur afin de réduire la contre-pression générée (Wolański 2013).

Semin et Golub (Roy et Frolov 2010) ont ingénieusement développé un autre concept du PDE. Il s'agit du concept du système dit à deux temps. La Figure I-13 montre une vue schématique de ce système ainsi que de son mode de fonctionnement.

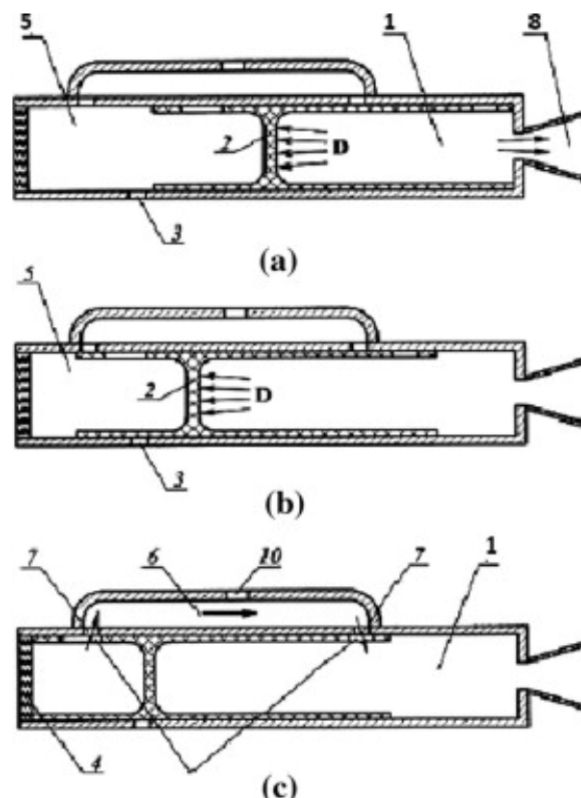


Figure I-13 : Principe de fonctionnement d'un PDE à deux temps tiré de (Wolański 2013)

Comme le montre la Figure I-13, l'opération du moteur débute par l'initiation de la détonation du mélange gazeux dans la chambre principale (1), comme illustré sur la Figure I-13a. L'onde de choc résultante met en mouvement le piston (2) en le déplaçant vers la gauche,

accomplissant simultanément la compression de l'air frais qui occupait précédemment la chambre (5) par le biais de l'ouverture béante (3). En parallèle, les produits de détonation s'échappent par la buse (8), générant une impulsion de poussée. C'est grâce à cette force de détonation que le piston (2) se met en mouvement, en comprimant l'air contenu dans la chambre (5). Au moment où les fentes supérieures du piston et du cylindre principal s'alignent, l'air comprimé provenant de la chambre (5) est dirigé vers une chambre de répartition spéciale (6), où le carburant est injecté par le biais d'une ouverture (10). Le mélange comprimé, issu de la chambre de répartition (6), est ensuite acheminé vers la chambre principale (1). Étant donné que la pression dans la chambre (1) est inférieure à celle de la chambre (5), le piston (2) se déplace vers la droite. Une fois que le piston atteint l'ensemble de la buse, une nouvelle détonation est initiée dans la chambre principale (1), amorçant ainsi un nouveau cycle.

Malgré sa simplicité apparente, ce système pose de nombreux défis à résoudre, notamment l'optimisation des volumes et des dimensions pour garantir son fonctionnement optimal.

c-4) PDE avec turbine

Un système de propulsion hybride qui intègre une chambre de combustion à détonation pulsée (PDC : Pulsed Detonation Combustor) au sein d'un moteur à turbine à gaz classique, voire d'un turboréacteur, offre un potentiel considérable pour améliorer sensiblement l'efficacité opérationnelle globale du système, que ce soit dans des applications de propulsion ou de production d'énergie stationnaire. Cette amélioration découle des avantages offerts par l'optimisation du cycle thermodynamique de la PDC et de la turbine à gaz elle-même. Un exemple concret d'un tel système hybride à grande échelle, composé d'une turbine à gaz dotée d'une chambre de combustion à détonation pulsée (PDC), a déjà été construit et évalué dans une installation de GE facility (Figure I-14) (Dean et al. 2005) ; (Dean 2003).

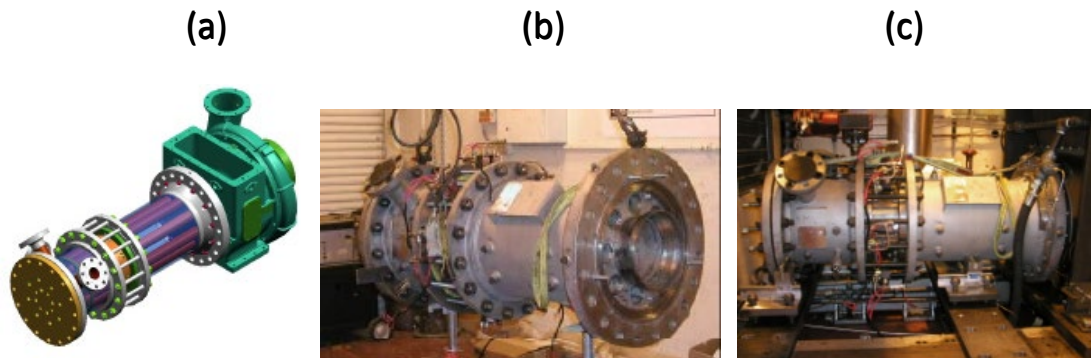


Figure I-14 : Vues du moteur hybride à turbine PDC : (a) Modèle informatique (b) PDC multitube et (c) Installé dans la section de test tirées de (Dean 2003)

Comme le montre la Figure I-14, le système est composé de huit tubes PDC disposés en une configuration annulaire intégrée à une turbine axiale à un seul étage, fonctionnant à une capacité nominale d'environ 4 kg.s^{-1} , à $25\,000 \text{ tr.min}^{-1}$ et produisant 1000 ch (cheval-vapeur). Les résultats des tests ont été concluants, le PDC fonctionnant à une fréquence allant jusqu'à 30 Hz par tube, en utilisant un mélange stœchiométrique d'éthylène/air (C_2H_4 -air) et un débit massique d'environ $4,5 \text{ kg.s}^{-1}$, tandis que la turbine et le compresseur tournent à $18\,500 \text{ tr.min}^{-1}$, générant une puissance de 350 ch (cheval-vapeur).

En plus de la turbine PDC, ce système hybride présente d'autres différences par rapport aux moteurs à turbines à gaz classiques. Il possède un collecteur qui distribue l'air comprimé aux tubes PDC individuels par le biais de vannes spéciales. Contrairement aux moteurs à turbines à gaz traditionnelles, il intègre un compresseur supplémentaire appelé pompe de dérivation. Cette pompe de dérivation fournit de l'air supplémentaire, nécessaire à la fois pour refroidir le PDC et pour enrichir les produits de détonation de la PDC en air. Cette augmentation d'air comprimé est essentielle car la pression en sortie du PDC est plus élevée que celle en sortie du compresseur principal.

c-5) Application du PDE : 1^{er} vol

Le premier vol du PDE dans les applications réelles a lieu en janvier 2008 au port aérien et spatial de Mojave aux Etats-Unis. Lors de cet essai, l'avion a décollé et atterri grâce à un turboréacteur classique. En revanche, pendant ce vol le PDE a été activé durant 10 secondes. La Figure I-15 présente la photo du premier vol du PDE développé par une équipe de recherche de l'US air force (« Pulsed detonation engine flies into history > Wright-Patterson AFB > Article Display » 2008).



Figure I-15 : Photo du premier vol d'un avion équipé d'un système de propulsion PDE, développé par une équipe du laboratoire de recherche de l'US Air Force tirée de (« Pulsed detonation engine flies into history > Wright-Patterson AFB > Article Display » 2008)

c-6) Moteurs à détonation rotatifs : RDE (Rotating detonation engines)

Dans les années 1960, Voitsekhovskii (Voitsekhovskii 1960) a introduit le concept d'un moteur à détonation rotative (RDE) où une ou plusieurs détonations se propagent dans une chambre de combustion annulaire continuellement alimentée en gaz frais, illustré sur la Figure I-16.

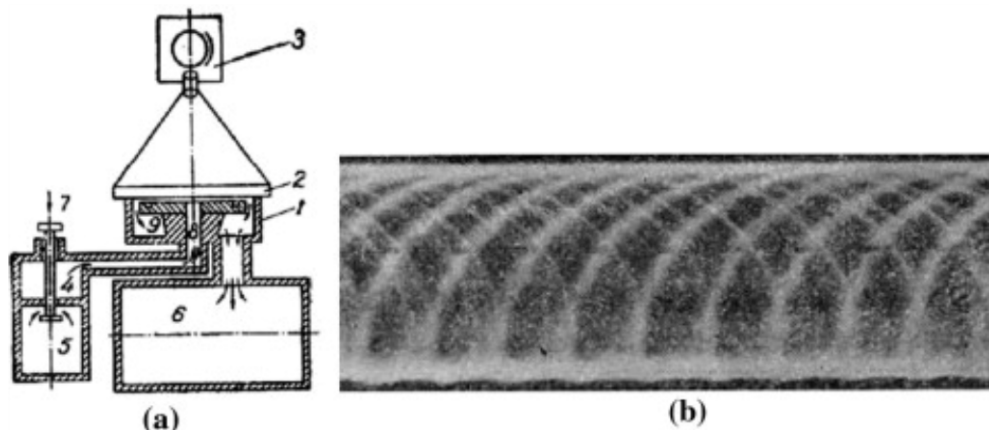


Figure I-16 : a) Schéma de principe de la chambre de détonation : 1= chambres de détonation, 2= fenêtre en plexiglas, 3=caméra à tambour, 4= conduite d'alimentation en mélange, 5= réservoir de mélange frais, 6= chambre de décharge basse pression et 7= vanne et (b) photo de compensation d'une détonation rotative à six têtes tirés de (Wolański 2013)

Les expérimentations ont été réalisées en utilisant des mélanges oxy-acétylène stœchiométriques à une pression relativement basse, au sein d'une chambre en forme de disque directement reliée à une chambre de décharge basse pression (Figure I-16.a (Wolański 2013)). Cette chambre permet d'évacuer les produits de la détonation avant d'injecter les gaz frais dans la chambre 1 et réaliser la détonation suivante. L'exploitation de la détonation au lieu de la déflagration offre théoriquement une augmentation de l'efficacité du moteur par rapport aux moteurs conventionnels. Bien que des résultats prometteurs aient été obtenus (Frolov et al. 2018) ; (Bach et al. 2021) ; (Naples et al. 2017), il n'existe à ce jour aucune étude expérimentale concluante démontrant une augmentation concrète de l'efficacité des RDE.

1.1.3 Propriétés de la déflagration telle qu'employée dans le domaine des transports

Les moteurs d'avion conventionnels fonctionnent en utilisant la poussée générée lors de la phase d'échappement des gaz brûlés produits par la combustion d'un mélange explosif. Dans ce processus, l'énergie chimique est libérée par une flamme se propageant à une vitesse de quelques mètres à quelques dizaines de mètres par seconde à travers le mélange carburant. Cette vitesse, relativement lente, permet à la pression des gaz de s'équilibrer presque instantanément de part et d'autre de la zone de réaction. Cet équilibre des pressions ne permet pas aux gaz brûlés de se détendre rapidement pour créer une onde de choc à l'intérieur de la chambre de combustion. L'équilibre mécanique se rétablit donc de manière dynamique à la vitesse du son dans les gaz, soit quelques centaines de mètres par seconde.

Les moteurs basés sur ce principe, où une déflagration se produit dans une enceinte presque homogène à un moment donné et souvent constante dans le temps, ont atteint des performances si élevées qu'il est difficile de les améliorer davantage à l'avenir.

Les recherches actuelles visant à améliorer les performances de la propulsion aéronautique ne se limitent plus à augmenter simplement la puissance de la source d'énergie embarquée. Elles se tournent de plus en plus vers de nouveaux modes de propulsion. La reformulation des carburants reste un défi important, principalement pour des raisons environnementales, dans le but de concilier performances élevées et combustion propre.

Parmi les nouvelles approches envisagées, l'une d'entre elles consiste à réduire la durée typique de la libération d'énergie, afin d'augmenter la puissance au sens physique (c'est-à-dire le travail fourni par unité de temps) et de changer le type de cycle thermodynamique de la combustion (IMBERT 2004).

1.1.4 Evaluation des performances

Le dispositif PDE peut être considéré comme un moteur à réaction de combustion interne fonctionnant de manière alternative et irrégulière (Desbordes et al., 2003). Comme c'est le cas pour tous les propulseurs de ce type, la poussée notée P_{PDE} (exprimée en Newtons) dépend du produit de l'impulsion spécifique I_{sp} (exprimée en secondes), du débit massique $\dot{m}$ de consommation de carburant (exprimé en kg.s^{-1}), et de l'accélération due à la gravité $g = 9,81 \text{ m.s}^{-2}$. Elle se calcule par l'équation suivante :

$$P_{PDE} = g.m. I_{sp} \quad \text{Eq.I-1}$$

avec : P_{PDE} : poussée (N)

g : accélération de pesanteur ($g = 9,8 \text{ m.s}^{-2}$)

$\dot{m}$: débit massique (kg.s^{-1})

I_{sp} : impulsion spécifique (s)

L'impulsion spécifique I_{sp} représente la durée pendant laquelle une charge de masse unitaire (1 kg) génère une poussée équivalente à son propre poids à la surface de la Terre (9,81 N).

Dans le cas d'un fonctionnement aérobique, cette charge correspond au carburant embarqué, car l'air nécessaire à la combustion est fourni par l'atmosphère environnante.

L'impulsion spécifique I_{sp} est mesurée expérimentalement en évaluant la surpression générée par l'échappement des gaz et la durée pendant laquelle cette surpression est maintenue sur la paroi du propulseur (IMBERT 2004) :

$$I_{sp} = S_{CC} \cdot \int_0^{\infty} \Delta p(t) \cdot dt \quad \text{Eq.I-2}$$

Avec : $\Delta p(t)$: représente la surpression de part et d'autre de la paroi ouverte du tube à l'interface (Pa)

S_{CC} : la section égale dans le cas du PDE à la surface du mur de poussée (m^2)

Le tableau I-1 présente une comparaison entre l'impulsion spécifique calculée et mesurée résultant des calculs en 2D, ainsi que les mesures effectuées lors d'un autre mode de fonctionnement pulsé dans la même chambre de combustion. Ces valeurs sont tirées de (Roy et al. 2004).

D'après le Tableau I-1, on remarque que l'impulsion spécifique est souvent de plusieurs centaines de secondes. Plutôt que de remplir le tube avec un Front d'Attaque de Mélange (FAM) puis de le faire exploser, les auteurs ont généré une onde de choc réactive et produit une impulsion en injectant un mélange chaud riche en carburant dans l'air. Les carburants de départ, le nitro-méthane (NM) et l'IPN (isopropyl de nitrate : $C_3H_7NO_3$), ont été utilisés. Ils ont subi une décomposition partielle dans la phase condensée, et les produits ainsi que le carburant non réactif ont été injectés dans le tube. Les lignes NM+Al (injection) et IPN (injection) comparent les résultats des calculs avec les mesures.

Tableau I- 1 : Comparaison de l'impulsion spécifique calculée et mesurée (Roy et al. 2004)

	$I_{sp,f}$ (S) extrémité ouverte (calcul)	$I_{sp,f}$ (S) extrémité fermée (calcul)	$I_{sp,f}$ (S) mesure
NM (Nitro-méthane) +Al (Aluminium) (injection)	442	-	150
NM+air (homogène)	455	495	-
IPN (Isopropyl de nitrate) (injection)	241	273	250-300
IPN+air (homogène)	671	686	600-700
Propène+air	1900	1930	1600-1730
Hydrogène+air	4145	-	-

Deux observations intéressantes émergent des résultats présentés dans le Tableau I-1. Tout d'abord, l'injection de carburant réactif n'est pas nécessairement inférieure à la détonation en termes de performances (voir les deux premières lignes). Au contraire, les calculs montrent qu'une fraction significative des produits de décomposition du NM quitte la chambre de combustion sans réagir. Par conséquent, avec un meilleur mélange, l'impulsion produite par le NM projeté serait plus élevée. En outre, on remarque que le mélange du jet avec l'air contrôle l'impulsion. Les calculs démontrent que seule une petite fraction du matériau injecté a le temps de réagir avec l'air, ce qui indique que seuls les dispositifs à jets multiples pourraient être efficaces. L'utilisation d'un injecteur à deux orifices légèrement décalés le long de l'axe du tube augmente l'impulsion spécifique mesurée d'environ 50 s, suggérant que seuls les appareils à jets multiples pourraient être efficaces.

Les valeurs mesurées de l'impulsion spécifique du carburant pour les jets IPN sont bien inférieures à celles d'une détonation homogène. Pour comprendre la raison pour laquelle l'impulsion produite par des mélanges homogènes IPN-air est environ deux fois plus élevée que l'impulsion générée par les jets IPN, un ensemble de calculs numériques a été effectué. Comme le montrent les calculs (deux premières colonnes), la raison principale est la

combustion incomplète du matériau injecté provoquée par l'expansion rapide du jet et la formation d'un écoulement bouchon au début du tube (Roy et al. 2004).

1.1.5 Présentation succincte des avantages et inconvénients du moteur PDE

Les bénéfices du moteur à détonation pulsée (PDE) dans le contexte de la propulsion aérobique comprennent sa simplicité et sa facilité d'adaptation à différentes échelles, une consommation de carburant réduite, ainsi que la capacité intrinsèque de fonctionner efficacement sur une plage de vitesses allant de l'immobilité jusqu'à des vitesses de vol supersoniques élevées.

Pour tirer parti des avantages des moteurs à détonation pulsée (PDE), les efforts doivent être apportés pour résoudre un certain nombre de problèmes techniques. Ces défis sont principalement liés à la réalisation et au contrôle de la production des détonations successives.

Pour garantir le développement du PDE, il est ainsi nécessaire de mettre en œuvre :

1- Des systèmes efficaces d'injection de carburant liquide et d'alimentation en air pour assurer un mélange rapide et quasiment homogène des composants dans la chambre de détonation.

2- Une source d'énergie faible pour initier la détonation de manière rapide et fiable.

3- Une technique de refroidissement rapide, de préférence récupératrice, pour évacuer la chaleur des parois de la chambre de détonation, assurant ainsi un fonctionnement stable et prévenant un allumage prématuré du Front d'Auto-allumage (FAM), ce qui conduirait à un échec de détonation.

4- Une géométrie de chambre de combustion favorisant l'initiation et la propagation de la détonation, tout en minimisant les pertes de pression, assurant ainsi une fréquence de fonctionnement élevée.

5- Une méthodologie de contrôle permettant un ajustement actif et adaptatif du processus opérationnel pour garantir des performances optimales dans des conditions de vol variables, tout en maintenant une marge de stabilité.

Outre ces problèmes fondamentaux liés aux processus à l'intérieur de la chambre de détonation, d'autres défis existent. Ils portent sur :

1- L'intégration efficace à la chambre de combustion de buses de remplissage des gaz pour des performances élevées.

2- Le couplage efficace des différentes chambres de détonation dans la configuration PDE multitube.

Parmi les problèmes d'ingénierie existants, le plus complexe et le plus préoccupant est celui de la durabilité du système de propulsion. En effet, les composants structurels du PDE, soumis à des chocs répétés à haute fréquence et à des déformations thermiques, sont susceptibles de subir une usure significative au cours d'une période de fonctionnement relativement courte.

1.2 Objectifs de l'étude

Les thématiques abordées dans ce travail se rapportent à l'étude du moteur à détonation pulsée (PDE) et plus précisément au système initiateur de la détonation. Le PDE est un nouveau dispositif de technologie de propulsion innovateur, qui a une application potentielle dans tout le domaine du vol subsonique, supersonique et hypersonique (Tangirala et al. 2005).

Au cours des récentes décennies, le PDE a gagné en reconnaissance en tant que système de propulsion aérospatiale potentiel en raison de son exceptionnelle efficacité énergétique et de sa capacité à générer une importante force de propulsion (Wang et al. 2015) ; (Wolański 2013). Divers carburants ont été expérimentés avec le PDE, notamment l'hydrogène (H_2), l'éthylène (C_2H_4) et le propane (C_3H_8) (Lu, Carter, et Wilson 2011) ; (Meyers, Lu, et Wilson 2003), ainsi que l'éthylène (Hinkey, Bussing, et Kaye 1995a) ; (Ma et al. 2002) et l'hydrogène (Schauer, Stutrud, et Bradley 2001) ; (Hinkey, Bussing, et Kaye 1995a).

Toutefois, la pénurie croissante de ressources énergétiques et les préoccupations concernant les émissions polluantes ont incité de nombreux chercheurs à explorer d'autres sources d'énergie durables. Ces travaux sur la recherche des sources d'énergie durables ont

permis de déduire que le propane est un candidat idéal pour les raisons développés ci-dessous.

1.2.1 Choix du propane comme carburant

Pour les applications de propulsion, un hydrocarbure liquide (ou tout autre composé liquide) est, en raison de sa densité énergétique élevée, le choix privilégié en tant que carburant. L'exigence d'un mélange rapide du carburant avec l'air entrant implique que le carburant PDE doit présenter une pression de vapeur élevée dans les conditions de fonctionnement. Une solution envisageable pour répondre à cette exigence est le préchauffage ou la vaporisation partielle du carburant par récupération de la chaleur du système. Cependant, il est important de noter que la présence d'hydrocarbures non volatils et d'additifs contenant des métaux et des composés polymères dans le carburant PDE peut favoriser une inflammation prématurée en raison de leur propension à former des dépôts. Ces dépôts sont connus pour induire un effet d'isolation thermique, augmentant ainsi la température des parois.

En tant que composant principal du gaz de pétrole liquéfié (GPL), le propane (C_3H_8) est considéré comme un carburant durable et propre avec un avenir promoteur pour les appareils électriques. Tout d'abord, le propane a une composition simple et un faible potentiel de formation d'ozone, ce qui réduit les problèmes de réchauffement climatique et d'aggravation de l'environnement (Movileanu et al. 2020). Puis, le propane est facile à liquéfier sous pression modérée, ce qui facilite son transport et son stockage (Yap et al. 2005). Enfin, les processus de production de propane sont simples et bon marché. Compte tenu de ces avantages, le propane en tant que carburant alternatif au pétrole a attiré une large attention (Yeom, Jang, et Bae 2007). Afin d'étendre l'utilisation du propane, les chercheurs se sont engagés dans l'application du propane dans divers contextes industriels, tels que le moteur à combustion interne (Tang et al. 2008), (Bosschaart et De Goey 2004), le moteur à fusée (Smith et al. 2000) ; (Tiliakos et al. 2001) , ...etc.

En effet, le propane est l'un des hydrocarbures les plus simples pouvant être représentatifs des hydrocarbures supérieurs utilisés dans de nombreuses applications pratiques. Austin et Shepherd (Austin et Shepherd 2003) ont suggéré que le propane pouvait être utilisé comme

un carburant de substitution pour le JP-10 pour des études préliminaires sur les moteurs à détonation pulsée (Austin et Shepherd 2003). En effet, les propriétés de détonation du propane (en particulier, la taille de la cellule de détonation) sont proches des carburants hydrocarbonés plus lourds tels que le JP-10 et le kérosène (Akbar et al. 2000) ;(Bull, Elsworth, et Hooper 1978) qui sont des carburants généralement utilisés dans les moteurs à détonation pulsée comme le montre la Figure I-17.

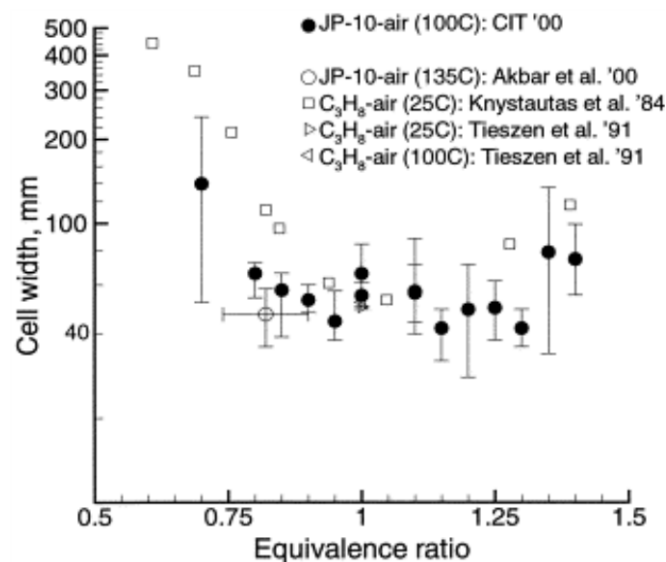


Figure I-17 : Largeur de cellule de détonation en fonction du rapport d'équivalence mesurée pour différents mélanges de carburants/air : JP-10 et propane. Ce graphique est tiré de (Austin et Shepherd 2003)

En outre, de nombreuses études expérimentales et numériques portant sur la détonation du propane existent dans la littérature (Tiliakos et al. 2001; Smith et al. 2000) (Silvestrini et al. 2008; Penyazkov et al. 2005) et son mécanisme cinétique est disponible dans la littérature en tant que sous-modèle cinétique pour les hydrocarbures lourds. C'est pour ces raisons que le propane a été choisi comme carburant dans le cadre de cette thèse.

1.2.2 IPN (IsoPropyl de Nitrate) comme promoteur

Le nitrate d'isopropyle, également connu sous le nom d'IPN ($C_3H_7NO_3$), est un composant essentiel dans l'industrie des carburants propulseurs (Zeng, Liang, et Zhang 2021). Son utilisation est répandue dans divers secteurs tels par exemple celui du pétrole ou le domaine aérospatial. Il est employé à la fois comme carburant propulseur (Ambekar et al. 2014) et comme additif pour améliorer les performances des systèmes de propulsion à

détonation (Zhou et al. 2017). Le tableau I-2 rassemble les propriétés de l'IPN et les compare à celles du JP-10.

Tableau I- 2 : Propriétés de JP-10 et IPN

Paramètres	JP-10	IPN
Masse molaire (kg.mol^{-1})	153	105
Masse volumique (kg.m^{-3})	0,81	2,42
Energie d'activation (J.kmol^{-1})	$6,85 \cdot 10^7$	$1,24 \cdot 10^8$
Facteur pré-exponentiel ($\text{kmol.m}^{-3}.\text{s}^{-1}$)	$8,12 \cdot 10^{12}$	$5 \cdot 10^{10}$
Enthalpie à l'état standard (J.kmol^{-1})	$-4 \cdot 10^9$	$-1,8408 \cdot 10^8$
Entropie à l'état standard ($\text{J.kmol}^{-1}.\text{K}^{-1}$)	389474, 7	374000
Capacité calorifique ($\text{J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$)	Linéaire sur certains domaines de température	Linéaire sur certaines domaines température

L'IPN est reconnu pour ses excellentes propriétés en tant que carburant haute performance notamment pour sa non-toxicité, sa non-corrosivité, son coût abordable, sa sensibilité élevée aux explosions et sa large plage de concentration d'explosion (de 2 % à 100 %) (Liu et Wang 2017). Comme le montre le Tableau I-2, les caractéristiques physiques et chimiques font de l'IPN un élément crucial en tant que promoteur de l'inflammation ou de la détonation (Roy et al. 2004).

Cependant, il est important de noter que lorsqu'une vapeur de carburant contenant de l'IPN est mélangée à l'air et atteint une concentration critique, elle présente un risque élevé de combustion ou même d'explosion (Gifford, Proud, et Field 2002). Le risque d'exposition lié à l'utilisation de l'IPN limite son utilisation à l'échelle industrielle. A la suite d'un accident d'explosion dans une usine au Danemark impliquant le nitrate d'isopropyle, Hedlund et al.

(Hedlund et al. 2014) ont recensé les accidents similaires survenus au cours des 15 dernières années.

Cette étude a démontré qu'un mélange à haute concentration de carburant et d'air peut se former pendant la production et le transport, confirmant ainsi les propriétés explosives marquées des concentrations élevées d'IPN. Par conséquent, l'analyse des caractéristiques de détonation du mélange de JP-10 et d'IPN est essentielle pour évaluer les propriétés du carburant, optimiser son rendement énergétique et améliorer la sécurité de la production. Les recherches actuelles se penchent sur les caractéristiques de détonation du mélange de JP-10 et d'IPN pour différentes fractions massiques grâce à des calculs numériques.

Ainsi, la question des régimes optimaux de fonctionnement des moteurs à détonation pulsée et l'atteinte de leurs meilleures performances exigent encore des études approfondies.

1.2.3 Etudes antérieures portant sur l'utilisation du propane et IPN dans le moteur à détonation pulsé

Les premières expérimentations visant à exploiter l'énergie générée par les explosions à des fins de propulsion remontent à la fin du XVIIe et au début du XVIIIe siècle, marquant les contributions remarquables de scientifiques tels que Huygens et d'Allen. En 1729, Allen a conçu un concept novateur : un navire propulsé par réaction, où la propulsion était générée par l'explosion de poudre à canon à l'intérieur d'un moteur spécialement conçu intégré au navire (Roy et al. 2004). À cette époque, la poudre à canon était principalement utilisée dans l'artillerie à des fins destructrices. La vision avant-gardiste d'Allen a ainsi ouvert la voie à l'exploration des applications propulsives des explosions, dépassant le cadre traditionnellement destructeur de la poudre à canon.

L'intérêt mondial porté au développement des (PDE) pour la propulsion a conduit de nombreuses études sur les détonations, en particulier en ce qui concerne leur maîtrise et leur confinement.

Comme le propane a des propriétés de détonations similaires à celles des hydrocarbures lourds tel que JP-10 (l'un des carburants potentiels pour les applications PDE), des études ont été menées.

Smith et ses collègues (Smith et al. 2000) ont effectués des tests sur un site d'essai de fusée à échelle réduite construit à la périphérie du campus de l'UAH (universitaire de l'Alabama à Huntsville), capable de gérer des tirs de fusée allant jusqu'à 136 kg. Leur objectif était de maîtriser l'allumage et d'évaluer la stabilité et le fonctionnement, à l'échelle du laboratoire, d'un moteur de fusée chimique utilisant un mélange d'oxyde nitreux N_2O et de propane liquide. L'utilisation de ce mélange comme oxydant et carburant dans un moteur-fusée chimique liquide offre la possibilité d'une alternative à haute énergie et respectueuse de l'environnement par rapport à la propulsion chimique traditionnelle. La réalisation de tests réussis d'un moteur-fusée à oxyde nitreux nécessite la présence d'une installation établie et sécurisée. Un système existant de distribution de flux, conçu pour tester plusieurs systèmes dans différentes configurations, a été reconfiguré pour cette série de tests avec une capacité de pression pouvant atteindre jusqu'à 1334,5 N (Figure I-18).

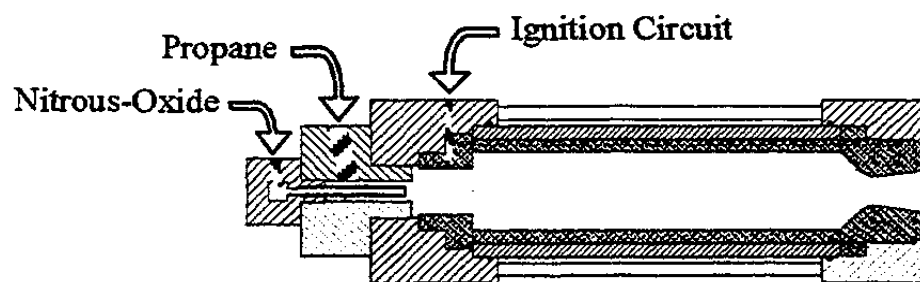


Figure I-18 : Schéma du moteur à Oxyde nitreux/propane, tiré de (Smith et al. 2000)

La Figure I-18 montre un schéma du moteur à protoxyde d'azote. Le système de distribution de flux principal se compose de deux sections : le côté principal de l'oxydant et le côté de l'allumage. Cette configuration particulière offre la possibilité d'utiliser trois propergols distincts, chacun disposant de son propre système de purge.

En 2001, Tiliakos et al. (Tiliakos et al. 2001) ont poursuivi leur étude qui visait à identifier un catalyseur potentiel pour les essais de fusées et à déterminer le/les matériau(x) de catalyseur optimal pour un prototype futur qualifié pour l'espace. Les travaux initiaux ont abouti à une démonstration réussie des technologies clés associées au développement d'un tel système de propulsion. En particulier, les performances de la fusée pour les propergols NOP et la décomposition catalytique de l'oxyde nitreux ont été démontrées. Le développement et les tests d'un système de fusée NOP et énonce les travaux nécessaires pour

développer davantage ce concept. Les expériences en laboratoire ont démontré que la décomposition catalytique du protoxyde d'azote N_2O pur, circulant sur le catalyseur de référence Shell 405, est réalisable à une température de 204,4 °C. Cette température est réduite à environ 93,3°C avec l'utilisation de petites quantités d'un hydrocarbure (par exemple, du propane C_3H_8 ou du propylène C_3H_6). Ils concluent que L'oxyde nitreux présente un avantage supplémentaire en tant que propergol spatial, car il se stocke sous forme liquide et s'injecte sous forme gazeuse.

Austin et Shepherd (Austin et Shepherd 2003) ont étudié la détonation des hydrocarbures lourds présentant un intérêt pour les applications des moteurs à détonations pulsés. Les expériences ont été réalisées dans un tube de détonation gazeuse en acier inoxydable de 7,3 m de longueur et de 280 mm de diamètre (Figure I-19). Les expériences ont été menées dans des mélanges vapeur de JP-10 à 353 K sur une plage de rapports d'équivalence ($0,7 \leq ER \leq 1,4$), de dilutions d'azote (oxygène-carburant par rapport à l'air-carburant) et de pressions initiales (20-130 kPa). Avant chaque tir, une feuille d'aluminium ou "feuille" (0,61 m × 0,91 m × 0,5 mm) est roulée, rivetée à un anneau en acier et recouverte d'une fine couche de suie. Pour les expériences à des températures élevées, les feuilles d'aluminium sont d'abord enduites d'une fine couche de silicone Dow-Corning DC200 (viscosité 20 cs) pour faciliter la rétention de la suie. La feuille est insérée dans l'extrémité aval du tube et fixée en place. L'ensemble du tube est évacué à environ 10 Pa, puis rempli par la méthode des pressions partielles.

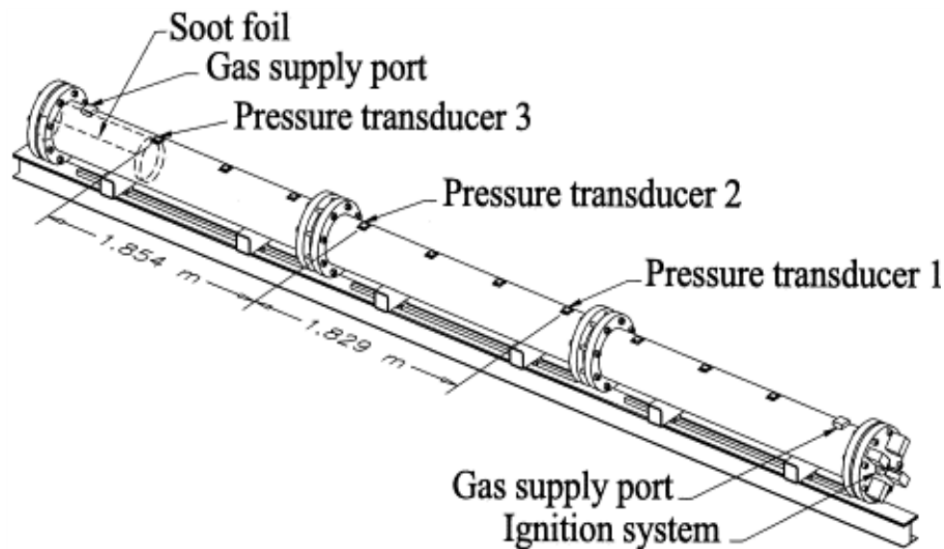


Figure I-19 : Tube de détonation gazeuse (Gaseous Detonation Tube) de 280 mm de diamètre, tiré de (Austin et Shepherd 2003)

En conclusion, les mesures de la largeur des cellules de détonation ont été effectuées dans divers mélanges d'hydrocarbures présentant un intérêt pour la propulsion aéronautique.

En 2004, Roy et al. (Roy et al. 2004) mettent l'accent sur les avancées récentes dans la recherche fondamentale et appliquée des moteurs à détonation pulsée (PDE), ainsi que sur divers concepts de conception de ces moteurs. Les discussions portent sur la compréhension actuelle des détonations de gaz et de milieu hétérogène composé d'aérosols, sur les bases thermodynamiques de la propulsion par détonation, sur les principes de mise en œuvre pratique du cycle thermodynamique basé sur la détonation, ainsi que sur les diverses contraintes opérationnelles des PDE. Ils citent entre-autre les études menées sur le propane et l'IPN.

Pour l'IPN, on compare l'impulsion spécifique calculé numériquement 2D avec celles mesurés dans des conditions identiques (Tableau I-1). Les expériences ont été réalisées dans des tubes en acier de 100 et 120 mm de diamètre d'une longueur variant de 1,2 à 2,5 m.

Pour le propane, on compare :

- la taille de cellule transversale mesurée à 25 et 100°C pour des mélanges air-carburant stœchiométrique avec d'autres hydrocarbures gazeux à la pression initiale de 100 kPa.
- l'impact de son addition d'1% au mélange $6\text{CH}_4 + 12\text{O}_2 + 82\text{Ar}$ à 1000 K et 101,325 kPa.
- Son diamètre critique pour la ré-initiation des détonations sphériques sous diffraction.

Liu et son équipe ont étudiés les caractéristiques et les étapes de la transition de la déflagration à la détonation (TDD) dans les mélanges brouillard d'isopropyle de nitrate/air (Q. Liu et al. 2011). Le dispositif expérimental se composait d'un tube expérimental, d'un système d'allumage électrique, d'une unité de contrôle, d'un système de mesure de pression, d'un système de décharge, d'une pompe à air et d'un réservoir de vidange de 10 m³ relié à trois tubes expérimentaux distincts (Q. Liu et al. 2011). Liu et son équipe concluent que le processus de TDD est observé dans les mélanges brouillard d'IPN/air sur une distance de transition de 14, 35m. Ils observent également une onde de détonation auto-entretenue avec une vitesse de propagation moyenne de 1600 m/s. En diminuant la concentration d'IPN de 450 g/m³ à 378 g/m³, le mécanisme de propagation du couple onde de choc zone réactionnelle (SRC : shock-reaction Complex) est passé de la détonation auto-entretenue à la déflagration à grande vitesse.

Hedlund et al. ont examiné une violente explosion dans un mélange d'acide nitrique et d'isopropanol (Hedlund et al. 2014) qui a eu lieu en 1997 dans une brasserie. L'opérateur à l'origine de cet accident a confondu les buses de remplissage de deux agents de nettoyage acides couramment utilisés et a transféré l'acide nitrique dans un réservoir contenant un nettoyant à base d'acide phosphorique et qui contenait également 5 à 15 % d'isopropanol. Environ 10 à 15 minutes plus tard, une explosion a eu lieu dans le réservoir en acier inoxydable qui s'est désintégré. L'explosion a dévasté la cave, a détruit le matériel, a soufflé un mur en maçonnerie et a libéré d'importantes quantités de vapeurs d'oxyde nitreux. Il est probable que l'acide nitrique ait réagi avec l'isopropanol pour former du nitrate d'isopropyle qui est aussi un propergol de fusée. Cet accident est considéré, en raison de l'utilisation répandue de ces produits dans l'industrie chimique, instructif pour évaluer la gravité et les conséquences des erreurs humaines lors de la manipulation du nitrate d'isopropyle.

Zhou et al. (Zhou et al. 2017) ont étudié les comportements thermiques, avec et sans ajout de nanomatériaux, d'un carburant (Fuel Air Explosive : FAE) contenant de l'IPN. Ils ont fait cette étude en utilisant la calorimétrie différentielle à balayage (DSC) couplée à l'analyse thermogravimétrie (TG/DSC-MS-FTIR). Les deux mélanges étudiés sont 1,3-diméthyladamantane/IPN (50/50) et 1,3-diméthyladamantane/IPN/Nano-Aluminium (30/30/40). Les Nano-particules d'Aluminium ont une taille de particules de 5 nm.

La température initiale de volatilité et d'évaporation du FAE (Fuel air Explosive) est beaucoup plus élevée en présence de nano-Al. Le nano-Al peut améliorer la stabilité FAE (1,3-diméthyladamantane/IPN) à basse température et peut jouer le rôle du catalyseur à haute température et favoriser sa décomposition thermique.

Zeng et al. (Zeng, Liang, et Zhang 2021) ont simulé numériquement les caractéristiques de détonation de l'IPN gazeux à des concentrations élevées par un calcul CFD et ont montré que l'IPN peut également détoner à des concentrations élevées. Les paramètres de détonation dépendent de la densité du mélange IPN/air. Cependant, lorsque la concentration est supérieure à la concentration stœchiométrique (285 g.m^{-3}), la température et la vitesse de détonation ne peuvent pas augmenter continuellement en raison de l'absence d'oxygène (L. Liu et Zhang 2020). La détermination des valeurs critiques de la densité du carburant et le rapport d'équivalence est utile dans l'optimisation du carburant.

Ambekar et al. (Ambekar, Sreedhara, et Chowdhury 2015) ont étudié expérimentalement les caractéristiques de la combustion dans l'air d'une goutte de l'IPN pur(mono-propulseur), le mélange IPN/ Dibutyl sebacate (DBS) et le mélange IPN/heptane pour caractériser l'influence du diamètre de la goutte et le pourcentage de l'IPN dans le mélange sur la variation du diamètre de la flamme.

2 Modes de propagation : la déflagration

La déflagration est la propagation d'une flamme, caractérisé par des vitesses subsoniques allant de quelques centimètres à quelques centaines de centimètres par seconde. Dans le cas des flammes laminaires La caractérisation d'un régime d'écoulement des gaz est basée sur la détermination de la vitesse de propagation de la flamme. La propagation de la flamme à une vitesse modérée est dite flamme laminaire si le nombre de Reynolds (Re) est strictement inférieur à 1 sinon turbulente. On distingue deux types de flammes laminaires : les flammes de diffusion et les flammes de pré-mélange.

Tout comme dans certains scénarios de flammes turbulentes, la propagation de la flamme est la conséquence à la fois au transfert de chaleur des gaz brûlés vers les gaz frais et la diffusion des espèces radicalaires. Dans ce paragraphe, nous étudierons spécifiquement la propagation d'une flamme laminaire d'un pré-mélange et les conditions de son initiation pour en déterminer les paramètres.

2.1 Flamme laminaire : flamme de prémélange

2.1.1 Vitesse fondamentale de flamme

a) Théorie de Mallard et Le Châtelier

La théorie de Mallard et Le Châtelier suppose que la propagation de la flamme est contrôlée par la propagation de la chaleur à travers les mécanismes réactionnels de gaz comme décrite par Glassman 1997 (Glassman 1997). Cette théorie considère qu'une flamme est composée de deux zones : une zone de préchauffage et une zone réactionnelle séparée par un point où se produit l'inflammation comme on peut le voir sur la Figure I-20.

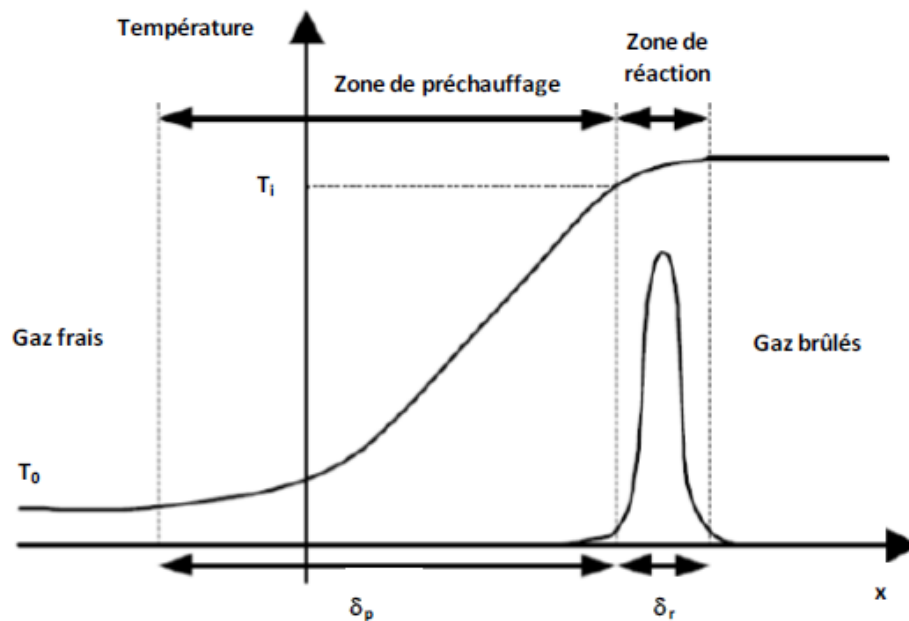


Figure I-20 : Structure de flamme selon la théorie de Mallard et Le Châtelier, tirée de (Grosseuvres 2018)

La Figure I-20 montre que dans la zone de préchauffage d'épaisseur δ_p , le flux de chaleur provenant des gaz brûlés élève la température initiale des gaz frais T_0 jusqu'à la température d'inflammation T_i . Dans cette théorie, on considère l'effet des réactions chimiques d'initiation de l'oxydation du carburant négligeable devant les effets de la diffusion thermique. Dans la zone réactionnelle d'épaisseur δ_r , la température augmente jusqu'à atteindre la température adiabatique de flamme T_b . Cette zone de réaction aussi appelée front de flamme permet de séparer conceptuellement les gaz frais des gaz brûlés.

En considérant une variation linéaire de la température dans la zone de réaction et connaissant son épaisseur δ_r , on peut alors facilement démontrer :

$$\dot{m}C_p(T_i - T_0) = \lambda \frac{T_f - T_i}{\delta_r} A \quad \text{Eq. I-3}$$

Avec : λ : conductivité thermique ($\text{W.m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$)

$\dot{m}$ le débit-massique de gaz à travers le front de flamme A la section unitaire (g.s^{-1})

et C_p la capacité calorifique à pression constante ($\text{J.kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$).

Etant donné que le problème décrit est fondamentalement unidimensionnel, le gaz frais s'écoule perpendiculairement à l'onde de combustion :

$$\dot{m} = \rho S_L A \quad \text{Eq. I-4}$$

Avec :

S_L la vitesse de la flamme laminaire (cm.s^{-1})

ρ : masse volumique des gaz frais (g.m^{-3})

Il vient alors l'expression de la vitesse de flamme laminaire qui s'écrit comme suit :

$$S_L = \left(\frac{\lambda (T_f - T_i)}{\rho C_p (T_i - T_0) \delta_r} \right) \quad \text{Eq. I-5}$$

Dans l'équation (Eq.5) obtenue par Mallard et Le Châtelier, l'épaisseur de la zone de réaction δ_r est inconnue. Cependant, on peut la relier δ_r à S_L via la vitesse globale de la réaction $\dot{\omega}$ par la relation suivante :

$$\rho S_L = \dot{\omega} \delta_r \quad \text{Eq. I-6}$$

Avec : $\dot{\omega}$ la vitesse globale de réaction (mol.s^{-1})

L'équation (Eq. I-5) pour la vitesse de la flamme devient alors :

$$S_L = \sqrt{\frac{\lambda (T_f - T_i)}{\rho C_p (T_i - T_0)} \frac{\dot{\omega}}{\rho}} \quad \text{Eq. I-7}$$

En remplaçant l'expression de δ_r dans l'équation (Eq. I-5), on établit une dépendance entre la vitesse de flamme laminaire S_L , la vitesse de la réaction $\dot{\omega}$ et la diffusivité thermique α dont l'expression est :

$$\alpha = \frac{\lambda}{\rho C_p} \quad \text{Eq. I-8}$$

Avec : α diffusivité thermique ($\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$)

Comme nous l'avons vu, la théorie de Mallard et Le Châtelier nécessite d'introduire le concept de température d'inflammation T_i . La détermination de la vitesse de flamme nécessite la connaissance de la température d'inflammation du mélange, la seule inconnue dans l'équation (Eq. I-7). Il est important de noter que l'expression de Mallard et Le Châtelier n'offre pas une solution précise pour la vitesse de flamme, mais elle met en lumière les modifications de cette vitesse en réponse aux variations des conditions initiales, notamment la pression, la température et la composition.

À la suite de cette première théorie, d'autres approches ont permis une amélioration des théories thermiques, notamment la théorie de Zel'dovich, Frank-Kamenetskii et Semenov [Semenov (1951) ; Zeldovich *et al.* (1985)].

b) Théorie de Zel'dovich, Frank-Kamenetskii et Semenov

La théorie de Zel'dovich, Frank-Kamenetskii et Semenov basée sur celle de Mallard et Le Châtelier considère également que le front de la flamme est divisé en deux zones : une zone de préchauffage et une zone de réaction. Des hypothèses additionnelles ont été introduites dans cette théorie pour établir une équation plus complète de la vitesse de flamme laminaire :

- Zel'dovich, Frank-Kamenetskii et Semenov ont introduit l'importance de la diffusion des molécules sur la vitesse de la flamme et ont tenu compte des paramètres de transport des espèces chimiques.

- Zel'dovich, Frank-Kamenetskii et Semenov ont supposé que la température d'inflammation T_i est très proche de la température de la flamme permettant d'éliminer T_i dans le développement mathématique

- Zel'dovich, Frank-Kamenetskii et Semenov ont supposé que la pression, la capacité calorifique à pression constante C_p et la conductivité thermique λ du mélange sont indépendants de la température.

Des nombres adimensionnels ont alors été définis comme suit pour tenir compte de la diffusion dans la détermination des vitesses de flamme :

- Le nombre de Prandtl, Pr (rapport entre viscosité cinématique ν et diffusivité thermique α) :

$$Pr = \frac{\nu}{\alpha} \quad \text{Eq. I-9}$$

Avec : Pr sans dimension et ν ($\text{m}^2.\text{s}^{-1}$)

- Le nombre de Schmidt, Sc (rapport entre viscosité cinématique et coefficient de diffusion massique D) :

$$Sc = \frac{\nu}{D} \quad \text{Eq. I-10}$$

Avec : Sc sans dimension et D ($\text{m}^2.\text{s}^{-1}$)

- Et le nombre de Lewis, Le (rapport entre diffusivité thermique et diffusion massique) :

$$Le = \frac{\alpha}{D} \quad \text{Eq. I-11}$$

Avec : Le sans dimension

Zel'dovich, Frank-Kamenetskii et Semenov suppose que les nombres de Prandtl, Schmidt et Lewis sont tous égaux à 1.

$$Pr=Sc=Le=1 \quad \text{Eq. I-12}$$

Il vient alors que la diffusion massique, la diffusion thermique et la viscosité cinématique sont constantes et égales : $D = \alpha = \nu$.

La flamme est considérée comme un problème unidimensionnel, stationnaire et adiabatique. On obtient l'équation de continuité de la masse à un élément de volume d'une flamme :

$$- (D\rho) \frac{d^2(\frac{C}{\rho})}{dx^2} + \dot{m} \frac{d(\frac{C}{\rho})}{dx} + \dot{\omega} = 0 \quad \text{Eq. I-13}$$

Avec : x la variable d'espace

Ainsi, l'équation énergétique est déterminée de la même manière :

$$-\lambda \frac{d^2T}{dx^2} + \dot{m} C_p \frac{dT}{dx} - \dot{\omega} Q = 0 \quad \text{Eq. I-14}$$

Avec :

Q : chaleur dégagée par la réaction (J)

C : concentration des réactifs ($\text{mol}.\text{m}^{-3}$)

Connaissant la vitesse globale de la réaction selon l'équation d'Arrhenius et considérant une continuité de flux thermique permettant de combiner les deux zones, on obtient l'expression suivante de la vitesse de flamme laminaire :

$$S_L = \sqrt{\frac{2}{C_0} \left(\frac{\lambda}{\rho_0 C_p} \right) (A e^{-E/RT_f}) \left(\frac{R T_f^2}{E(T_f - T_0)} \right)} \quad \text{Eq. I-15}$$

Avec :

A : le facteur de pré-exponentiel sans unité

E : l'énergie d'activation de la réaction (J.mol⁻¹)

R : La constante de gaz parfait (J.mol⁻¹.K⁻¹)

Dans l'établissement de l'équation (Eq.I-15), il a été supposé que le nombre de moles ne variait pas pendant la réaction.

Cette hypothèse peut être modifiée en introduisant le rapport (nr/np), correspondant au rapport du nombre de moles de réactifs (nr) et de produits (np). En tenant compte du nombre de Lewis, l'expression de la vitesse de flamme laminaire d'une réaction de premier ordre devient ainsi :

$$S_L = \sqrt{\frac{2 \lambda_f C_{pf} A}{\rho_0 \bar{C}_p^2} \left(\frac{T_0}{T_f} \right) \left(\frac{n_r}{n_p} \right) \text{Le} \left(\frac{R T_f^2}{E} \right)^2 \left(\frac{R T_f^2}{(T_f - T_0)^2} \right)} \quad \text{Eq. I-16}$$

Avec

C_{pf} : la capacité calorifique calculée à T_f (J.kg⁻¹.K⁻¹).

$\bar{C}_p^2$: la capacité calorifique moyenne entre T₀ et T_f (J.kg⁻¹.K⁻¹)

A la différence de la théorie de Mallard et Le Châtelier, cette approche montre que la vitesse de la flamme laminaire dépend de la température initiale, de la température adiabatique de flamme et de la vitesse globale de la réaction $\dot{\omega}$ qui dépend de l'énergie global d'activation selon l'équation suivante (Eq. I-17).

$$\dot{\omega} = A e^{-\frac{E}{RT}} \quad \text{Eq. I-17}$$

2.1.2 Energie d'activation et nombre Zel'dovich

D'après la théorie de Zel'dovich, Frank-Kamenetskii et Semenov, la vitesse de flamme laminaire S_L est proportionnelle à la racine de la vitesse globale de la réaction $\dot{\omega}$ selon l'équation Eq. I-18 :

$$S_L \propto \sqrt{\dot{\omega}} \quad \text{Eq. I-18}$$

A partir de l'équation (18), on peut déduire les équations suivantes :

$$S_L \propto \text{Cste.} \sqrt{e^{\frac{-E}{RT_f}}} \quad \text{Eq. I-19}$$

$$2 \ln S_L \propto \ln \text{Cste} - \frac{E}{RT_f} \quad \text{Eq. I-20}$$

Avec :

L'évolution de S_L en fonction de l'inverse de la température de flamme adiabatique T_f nous permet de déterminer l'énergie d'activation à partir de la pente de l'équation Eq. I-20.

La détermination de l'énergie d'activation permet de déduire le nombre de Zel'dovich β qui correspond à l'énergie d'activation normalisée par la température d'après la réaction suivante Eq. I-21:

$$\beta = \frac{E (T_f - T_0)}{R T_f^2} \quad \text{Eq. I-21}$$

avec : β sans unité

2.1.3 Epaisseur d'une flamme laminaire

Il existe plusieurs moyens pour définir l'épaisseur d'une flamme laminaire. Néanmoins, la définition la plus largement utilisée reste celle établie par Zel'dovich (1944) et qui décompose, comme l'a fait Mallard et Le Châtelier, le front de flamme en deux parties : une zone de préchauffage et une zone réactionnelle.

L'épaisseur de la zone de préchauffage δ_p , qui dépend de l'équilibre entre la diffusion thermique et la diffusion des espèces, est donnée par la formule ci-dessous :

$$\delta_p = \frac{\lambda}{C_p \rho_0 S_L^0} \quad \text{Eq. I-22}$$

Avec :

ρ_0 : la masse volumique des gaz frais (g.cm^{-3})

S_L^0 : la vitesse de flamme laminaire à étirement nul (cm.s^{-1})

L'épaisseur de la zone réactionnelle δ_r est déduit en divisant l'épaisseur de la zone de préchauffage δ_p par le nombre de Zel'dovich β :

$$\delta_r = \frac{\delta_p}{\beta} \quad \text{Eq. I-23}$$

L'épaisseur du front de flamme laminaire δ correspond à la somme ces deux épaisseurs δ_p et δ_r .

D'autres méthodes, basées sur l'utilisation d'un mécanisme réactionnel détaillé et en tenant compte des paramètres de transport des espèces chimiques, permettent de déterminer l'épaisseur d'une flamme laminaire. Ces méthodes prennent en compte à la fois la diffusion thermique et la diffusion des espèces (molécules, radicaux et atomes) pour obtenir une prédiction de l'évolution de la pression et de la température. En effet, à partir du profil de la température en fonction de la distance, il est possible d'obtenir l'épaisseur de la flamme laminaire. L'épaisseur est calculée à la différence entre les positions des intersections entre la tangente au gradient maximum de la température avec le minimum et le maximum de la température comme le montre la Figure I-21.

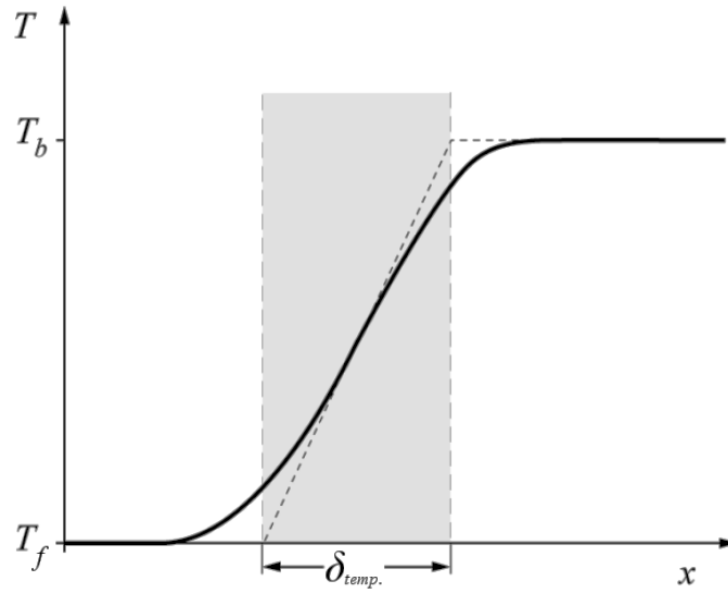


Figure I-21 : Détermination de l'épaisseur du front de flamme en utilisant le profil de température. Avec δ_{temp} la largeur de la flamme. T_f et T_b sont respectivement la température des gaz frais et des gaz brûlés, Schéma tiré de (GOULIER 2015)

2.1.4 Nombre de Lewis

Le nombre de Lewis (Le) est un paramètre qui permet de comparer l'importance de la diffusion thermique par rapport à la diffusion des espèces chimiques. Lorsque le mélange est appauvri en carburant, c'est le carburant lui-même qui est considéré comme l'espèce réactive limitante. À l'inverse, lorsque le mélange est riche en carburant, c'est l'oxygène qui devient l'espèce réactive limitante.

$$Le = \frac{\alpha}{D} \quad \text{Eq. I-24}$$

En revanche, lorsque l'on se rapproche de la stœchiométrie, la notion de réactif limitant perd de son sens, car les réactifs sont présents en proportions stœchiométriques. Afin de prendre en compte à la fois la diffusion de l'oxygène et du carburant dans des mélanges dont la composition varie, Addabbo et al. (Addabbo, Bechtold, et Matalon 2002) ont introduit le concept de « nombre de Lewis effectif, Le_{eff} ». Ce nombre permet de passer du nombre de Lewis associé au carburant dans les mélanges très appauvris au nombre de Lewis associé à l'oxygène dans les mélanges très riches. Sa définition est la suivante :

$$Le_{eff} = 1 + \frac{(Le_E - 1) + (Le_D - 1)A}{1 + A} \quad \text{Eq. I-25}$$

$$A = 1 + \beta(\phi - 1) \quad \text{Eq. I-26}$$

$$\phi = ER ; \forall ER \geq 1 \quad \text{Eq. I-27}$$

$$\phi = \frac{1}{ER} ; \forall ER \leq 1 \quad \text{Eq. I-28}$$

Avec Le_E : le nombre de lewis de l'espèce excédentaire ; Le_D : Le nombre de Lewis de l'espèce déficitaire et ER = le rapport d'équivalence ou la richesse (équivalence ratio) du mélange.

2.2 Méthodes de mesure de la vitesse fondamentale de flamme

Différents dispositifs expérimentaux permettent de mesurer les vitesses de flamme, on peut citer les brûleurs coniques (Dugger et Heimel 1952) (Gibbs et Calcote 1959)..., à contre-courant (Jomaas et al. 2005; Zhao et al. 2004)..., à flux de chaleur (Bosschaart et De Goey 2004)..., les tubes de combustion de complexité variable ou la méthode de la bombe sphérique (Takizawa et al. 2005; Tang et al. 2008) (Razus et al. 2010)... La méthode de la bombe sphérique est la mieux adaptée pour la détermination des caractéristiques d'une flamme de pré-mélange tel que la vitesse fondamentale de flamme S_L .

2.2.1 La méthode de la bombe sphérique

La méthode en bombe est la méthode la plus ancienne qui a permis les premières déterminations de vitesses de flamme. En 1934, Lewis et Von Elbe (Lewis et Von Elbe 1934) l'ont utilisée pour étudier des mélanges d'ozone et d'oxygène.

La bombe sphérique est un réacteur de forme sphérique conçu pour l'analyse des vitesses de propagation des flammes dans des mélanges carburants. Bien que ce dispositif existe depuis de nombreuses années, il a connu un développement significatif depuis l'avènement de la théorie asymptotique des flammes (Clavin 1985), qui a permis de déterminer la vitesse fondamentale de la flamme à étirement nul. Dans ce dispositif, une enceinte est remplie d'un mélange carburant, dont l'inflammation est déclenchée par une étincelle électrique. Deux fenêtres optiques placées en face l'une de l'autre permettent d'observer la flamme en

expansion à l'aide d'une caméra rapide. La Figure I-25 présente un schéma de principe de la bombe sphérique.

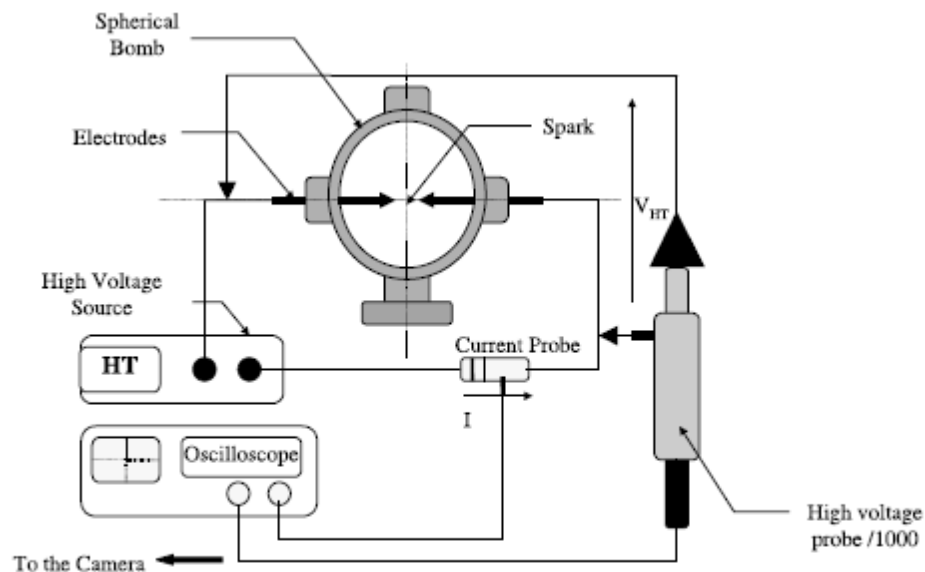


Fig. 1. Experimental layout.

Figure I-22 : Schéma de principe d'une bombe sphérique, tiré de (Lamoureux, Djebaïli-Chaumeix, et Paillard 2003)

La bombe sphérique peut également être équipée d'un capteur de pression pour mesurer l'évolution de la pression dans l'enceinte au cours du temps de l'expérience. Cette mesure permet, d'une part, de connaître le domaine dans lequel la pression reste constante et, d'autre part, de déterminer la pression maximale atteinte pendant l'expérience via sa vitesse maximale de montée.

La visualisation de la flamme est généralement réalisée en utilisant la méthode de strioscopie dite « Schlieren ». Cette technique spectroscopique, illustrée sur la Figure I-26, est basée sur la déviation des rayons lumineux parallèles provoquée par les variations de l'indice de réfraction du milieu traversé par ces rayons, induites par des variations de masses volumiques.

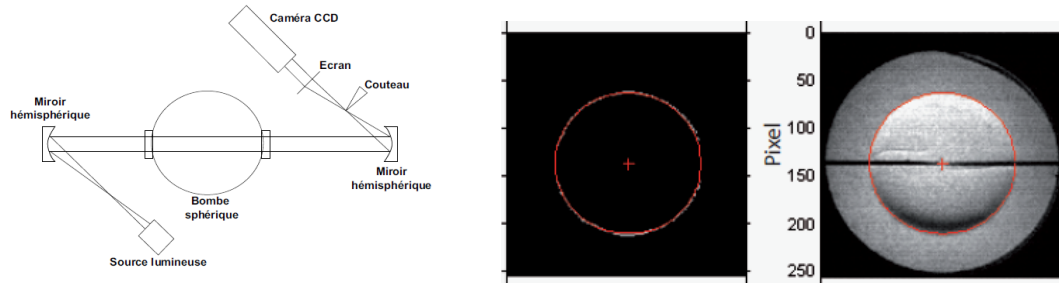


Figure I-23 : Schéma d'un montage Schlieren en Z et exemple d'image Schlieren obtenue en bombe sphérique (le front de flamme est matérialisé en rouge), tiré de (Mével 2009).

La fréquence d'acquisition de la caméra rapide et le diamètre de la fenêtre de visualisation sont des paramètres expérimentaux considérés respectivement équivalents à l'échelle temporelle et spatiale. Ces paramètres permettent d'obtenir le rayon de la flamme en fonction du temps et il est important de noter que la détermination de la vitesse de flamme est réalisée dans la partie linéaire de l'évolution du rayon de la flamme. En utilisant cette portion linéaire, il est possible de calculer la vitesse spatiale de la flamme à étirement nul, le taux d'étirement, ainsi que la longueur de Markstein L_b pour les gaz brûlés.

Expérimentalement, la vitesse spatiale de la flamme observée correspond à une vitesse de flamme étirée. Dans le cas d'une flamme à expansion sphérique, les effets d'étirement locaux sont principalement attribuables à la courbure du front de flamme. Pour un taux d'étirement faible, la vitesse spatiale de la flamme étirée, notée V_s , est liée à la vitesse spatiale à étirement nul, notée V_s° , de la manière suivante :

$$V_s = \frac{dR_f}{dt} = V_s^\circ - L_b \cdot \kappa \quad \text{Eq. I-29}$$

Avec :

R_f : le rayon de la flamme au temps t (mm)

L_b : la longueur de Markstein des gaz brûlés (mm)

κ : le taux d'étirement (s^{-1})

La longueur de Markstein, L_b , est un paramètre caractérisant la réponse de la flamme soumise à un étirement donné.

Pour une flamme en expansion sphérique, le taux d'étirement κ est défini par l'équation suivante (Lamoureux, Djebaïli-Chaumeix, et Paillard 2003) ; (Aung, Hassan, et Faeth 1997) :

$$k = \frac{dA}{A \cdot dt} = \frac{1}{R_f^2} \cdot \frac{dR_f^2}{dt} = \frac{2}{R_f} \cdot \frac{dR_f}{dt} = 2 \cdot \frac{V_S}{R_f} \quad \text{Eq. I-30}$$

Avec A : la surface de flamme (mm²)

Ronney et Sivashinsky (Ronney et Sivashinsky 1989) ont montré que lorsque l'étirement κ est faible, une relation non linéaire existe entre la vitesse de la flamme laminaire étirée V_S et le taux d'étirement κ , ensuite modifiée par Kelley et Law (Kelley et Law 2009) pour donner l'équation suivante :

$$\left(\frac{V_S}{V_S^\circ}\right)^2 \ln\left(\frac{V_S}{V_S^\circ}\right)^2 = -2 \left(L_b \cdot \frac{\kappa}{V_S^\circ}\right) \quad \text{Eq. I-31}$$

Dans ce travail, l'équation non linéaire (Eq. 31) a été utilisée afin d'obtenir la vitesse spatiale de la flamme non étirée V_S° (à étirement nul) et la longueur de Markstein L_b correspondante. La vitesse de flamme laminaire non étirée S_L^0 (à étirement nul) est dérivée de l'expression d'Eschenbach et Agnew (Eschenbach et Agnew 1958) pour obtenir la relation (Nativel et al. 2016a) :

$$S_L^\circ = \left(V_S^\circ + \frac{R_f}{3\gamma_b \cdot P_b} \cdot \frac{dP_b}{dt}\right) \left(\frac{M_b}{M_u}\right) \left(\frac{T_u}{T_b}\right) \left(\frac{P_b}{P_u}\right) \quad \text{Eq. I-32}$$

Avec : les indices « u » font référence aux gaz frais et « b » : aux gaz brûlés.

M : la masse molaire (g.mol⁻¹)

T : la température (K)

P : la pression (Pa)

t : le temps (s)

En considérant la phase initiale de propagation de la flamme où la pression ne varie pas encore, le terme $\frac{R_f}{3\gamma_b \cdot P_b} \cdot \frac{dP_b}{dt}$ est nul. En effet, dans nos expériences, à la fin de l'observation de la zone d'expansion de la flamme, le volume brûlé est d'environ 0,8% du volume total de la bombe et la pression reste constante lors de la visualisation de la propagation de la flamme (Nativel et al. 2016b). La flamme se propage donc véritablement à pression initiale constante. Par conséquent, la relation (Eq. I-32) devient :

$$S_L^\circ = V_S^\circ \cdot \frac{\rho_b}{\rho_u} = \frac{V_S^\circ}{\sigma} \quad \text{Eq. I-33}$$

Avec : ρ_b : la masse volumique des gaz brûlés (g.m⁻³)

ρ_u : la masse volumique des gaz frais (g.m^{-3})

σ : le facteur d'expansion sans unité

Pour caractériser l'étirement subi par la flamme et sa réponse à cet étirement, il est possible de relier le nombre de Karlovitz Ka et le nombre de Markstein Ma au rapport de la vitesse de flamme laminaire étirée S_L et la vitesse de flamme laminaire à étirement nul S_L° via l'équation suivante :

$$\frac{S_L}{S_L^\circ} = 1 - Ma \cdot Ka \quad \text{Eq. I-34}$$

Avec : Ka : le nombre de Karlovitz défini par l'équation suivante :

$$Ka = k \cdot \frac{\delta}{S_L^\circ} \quad \text{Eq. I-35}$$

Ma : le nombre de Markstein donné par l'équation suivante :

$$Ma = \frac{L_b}{\sigma \cdot \delta} \quad \text{Eq. I-36}$$

δ : l'épaisseur de flamme (m)

Cependant, cette méthode comporte plusieurs limitations. Pour obtenir une mesure de la vitesse de flamme précise, il est impératif de disposer d'un système d'acquisition d'images à fréquence élevée, garantissant un nombre suffisant d'images, chacune montrant une flamme parfaitement sphérique. Il est essentiel de travailler dans des conditions au sein desquelles la formation de cellules dans la flamme (appelée cellularité) est faible, ou d'exclure les images présentant de nombreuses cellules. En outre, les données nécessaires au calcul de la vitesse de flamme doivent être acquises dans les premiers centimètres de sa propagation, car au-delà de cette distance, les gaz frais sont comprimés par la flamme en expansion (Mével 2009).

Les équations Eq. I-29 et Eq. I-30 fournissent les équations requises pour calculer la longueur de Markstein pour les gaz brûlés, notée L_b . En se penchant sur la vitesse fondamentale de la flamme, définie comme la vitesse d'écoulement des gaz frais par rapport au front de flamme dans une direction perpendiculaire à celui-ci, nous pouvons déduire la longueur de Markstein associée aux gaz frais, notée L_u (en mm), à l'aide de l'équation suivante :

$$L_u = \frac{L_b}{\sigma} \quad \text{Eq. I-37}$$

2.2.2 Résultats expérimentaux issus de la littérature sur la vitesse de flamme

Dans cette section, seront abordées spécifiquement les études les plus importantes de la littérature sur les mesures des vitesses de flamme de propane et de propène. Ces données serviront de référence pour la validation des résultats expérimentaux obtenus au cours de cette étude et présentés plus loin dans ce mémoire.

a) Mesure de vitesses de flammes de propane

On dispose dans la littérature d'un nombre conséquent de données concernant les vitesses de flammes du propane. Le Tableau I-3 synthétise les données portant sur les vitesses de flammes de propane et les méthodes expérimentales utilisées pour différentes conditions de pressions, de températures et de richesses. La Figure I-24 présente la comparaison des mesures des vitesses de flammes de propane en fonction du rapport d'équivalence mesurées à pression atmosphérique et à température ambiante (291-300 K) obtenues avec différentes méthodes (mesures en bombe (bleu), avec la méthode à contre-courant (vert) et avec le brûleur adiabatique à flamme plate (rouge)) d'après (Dirrenberger 2014).

Tableau I- 3 : Tableau récapitulatif des principales mesures de vitesses de flammes de propane

Année	Auteurs	Technique	Températures étudiées (K)	Pressions étudiées (kPa)	Richesses étudiées
1952	Dugger et Heimel (Dugger et Heimel 1952)	Brûleur à buse	200-616	101,325	1,05
1959	Gibbs et Calcote (Gibbs et Calcote 1959)	Bec Bunsen	298	101,325	0,8-1,3
1963	Kuehl (Kuehl 1961)	Brûleur à fente	311-866,5	25,33-101,325	0,7-1,7
1980	Metghalchi et Keck (Metghalchi et Keck 1982)	Bombe	298-750	40,53-4053	0,8-1,5
1984	Gülder (Gülder 1982)	Bombe	300	101,325	0,7-1,4
1986	Yu <i>et al.</i> (Yu, Law, et Wu 1986)	Contre-courant	298	101,325	0,55-1,95
1988	Kawakami <i>et al.</i> (Kawakami, Okajima, et Iinuma 1989)	Bombe	293-298	101,325-810,6	0,54-2,41
1990	Egolfopoulos <i>et al.</i> (Egolfopoulos, Zhu, et Law 1991)	Contre-courant	298	25,33-303,975	0,25-3 0,54-1,75
1994	Vagelopoulos <i>et al.</i> (Vagelopoulos,	Contre-courant	298	101,325	0,6-1,6

	Egolfopoulos, et Law 1994)				
1998	Hassan <i>et al.</i> (Hassan et al. 1998)	Bombe	298	50,66-405,3	0,8-1,6
1998	Vagelopoulos et Egolfopoulos (Vagelopoulos et Egolfopoulos 1998)	Contre- courant	298	101,325	0,7-1,4
2004	Bosschaart et de Goey (Bosschaart et De Goey 2004)	Brûleur adiabatique à flamme plate	298	101,325	0,6-1,6
2004	Farrell <i>et al.</i> (Farrell, Johnston et Androulakis 2004)	Bombe	450	303,975	0,8-1,4
2004	Zhao <i>et al.</i> (Zhao et al. 2004)	Contre- courant	300-650	101,325	0,5-1,3
2005	Jomaas <i>et al.</i> (Jomaas et al. 2005)	Contre- courant	298	101,325-506,625	0,7-1,4
2005	Takizawa <i>et al.</i> (Takizawa et al. 2005)	Bombe	280-330	81,06-111,458	0,7-1,4
2008	Huzayyin <i>et al.</i> (Huzayyin et al. 2008)	Bombe	295-400	50,6625-405,3	0,7-2,2
2008	Tang <i>et al</i> (Tang et al. 2008)	Bombe	298	101,325	0,6-1,6
2010	Lowry <i>et al.</i> (Lowry et al. 2011)	Bombe	291-296	101,325-1013,25	0,7-1,3

2010	Razus <i>et al.</i> (Razus et al. 2010)	Bombe	298-423	30,398-121,59	0,63-1,58
2011	Veloo <i>et al.</i> (Veloo et Egolfopoulos 2011)	Contre-courant	343	101,325	0,7-1,5
2013	Hu <i>et al.</i> (Hu, et al. 2013)	Bombe	300-395	100,312-700,156	0,6-1,4

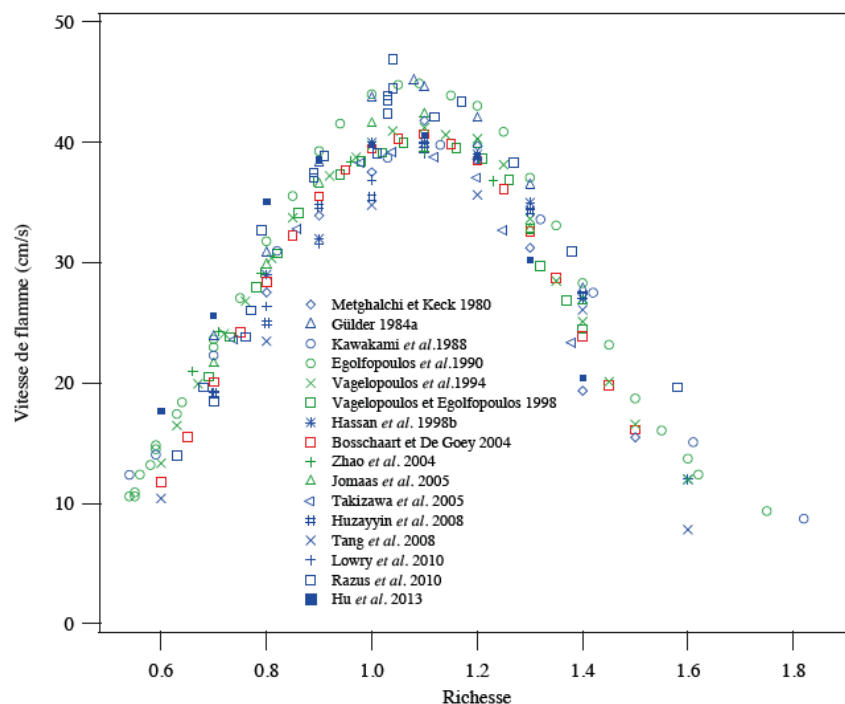


Figure I-24 : Vitesses de flammes de propane en fonction du rapport d'équivalence à $P=101,325 \text{ kPa}$ et température ambiante (291-300 K). Mesures en bombe (bleu), avec la méthode à contre-courant (vert) et avec le brûleur adiabatique à flamme plate (rouge), tirées (Dirrenberger 2014)

Les résultats de la Figure I-24 montrent que la variation de la vitesse de flamme en fonction du rapport d'équivalence (ou richesse) est représentée par une courbe en forme de cloche, dont le maximum est situé autour d'une richesse de 1,1. Les résultats rassemblées sur la Figure I-24 montrent un bon niveau de concordance entre les différentes méthodes de mesure de la vitesse de flamme.

b) Mesure de vitesses de flammes de propène

Il est important de noter que les données de la littérature de la vitesse de flamme de propène sont moins nombreuses que celles trouvées pour le propane. Les données disponibles proviennent principalement des études de Davis et Law (Davis et Law 1999), de Jomaas *et al.* (Jomaas et al. 2005), de Saeed et Stone (Saeed et Stone 2007), Burke *et al.* (Sinéad M. Burke et al. 2015) qui ont mesuré les vitesses de flammes de propène à température ambiante et pression atmosphérique. Les résultats sont rassemblés sur la Figure I-25 qui présente l'évolution de la vitesse laminaire de flamme en fonction du rapport d'équivalence.

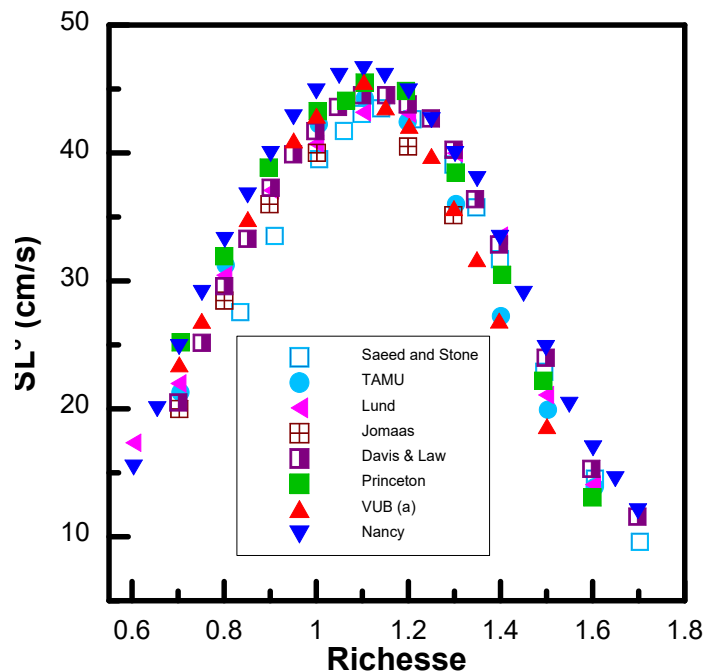


Figure I-25 : Evolution des vitesses de flammes laminaire du propène en fonction de la richesse à $P = 101,325 \text{ kPa}$ et température ambiante, d'après (Sinéad M. Burke et al. 2015)

Comme pour le propane, on observe une courbe en cloche centrée autour d'un rapport d'équivalence de 1,1. Les vitesses de flamme laminaire de l'Université de Princeton (Sinéad M. Burke et al. 2015), TAMU (Texas A&M University) (Sinéad M. Burke et al. 2015), de Jomaas (Jomaas et al. 2005) et de Saeed et Stone (Saeed et Stone 2007) ont été mesurées à l'aide d'une bombe sphérique.

Les vitesses de Davis et Law (Davis et Law 1999) ont été obtenues à l'aide de flammes à contre-courant sans extrapolation non linéaire.

VUB (Vrije Universiteit Brussel) et Lund Lund University) ont utilisés des brûleurs à flux de chaleur pour mesurer la vitesse de flamme laminaire.

Dans des conditions pauvres en carburant, les données de Princeton, VUB, TAMU et Lund montrent un bon accord entre elles. Cependant, dans des conditions riches en carburant, seules les mesures de VUB et TAMU sont en accord entre elles. Les données de Princeton montrent un bon accord avec les données de Davis et Law.

Ces incertitudes sont dû à cause de la méthode d'extrapolation différentes et les pertes radiatives.

3 Modes de propagation : Phénoménologie de la détonation

Le phénomène de la détonation a été analysé pour la première fois par Berthelot et Vieille (1881, 1882) et par Mallard et Le Châtelier (1881) qui ont observé, lors de leurs études sur la propagation des flammes, que la détonation correspond à une onde explosive se propageant à une vitesse supersonique.

Les analyses théoriques du phénomène ont commencé par les travaux de Chapman (1899) et Jouguet (1905) qui ont avancé l'hypothèse selon laquelle la détonation peut être perçue comme une discontinuité totalement réactive.

Zeldovich (1940), Von Neumann (1942) et Döring (1943) sont indépendamment parvenus à une théorie sur la structure de l'onde de détonation, appelé aussi modèle ZND. Ce modèle est fondé sur l'hypothèse qu'une détonation est considérée comme étant une auto-inflammation du mélange derrière une onde de choc. L'énergie libérée par la réaction chimique entretient la propagation de l'onde de choc responsable de l'élévation de la température et de la pression des gaz frais.

Dans les sections suivantes, les théories relatives à l'onde de détonation, sont rappelées et la structure réelle de la détonation est explicitée ainsi que les conditions nécessaires à son initiation et à sa propagation.

3.1 Théorie de Chapman et Jouguet

L'onde de détonation est assimilée à une onde plane, monodimensionnelle se propageant à une vitesse constante. L'écoulement est adiabatique et les gaz sont considérés

comme des gaz parfaits. Si l'on considère que la référence est l'onde de détonation, on note la vitesse des gaz frais par rapport à l'onde u_1 (égale à la vitesse de Chapman Jouguet D_{CJ}) et on note la vitesse derrière le choc u_2 . Dans le référentiel du laboratoire, on note, par rapport à l'onde de choc, V_1 la vitesse du gaz frais (égale à 0 pour le gaz au repos) et V_2 la vitesse du gaz après le passage de l'onde de choc. L'indice 1 désigne l'état initial, c'est-à-dire l'état des gaz avant le passage de l'onde de choc et appelé « gaz frais », tandis que l'indice 2 symbolise l'état des gaz après le passage de l'onde de choc « gaz brûlés » comme cela est schématisé sur la Figure I-26.

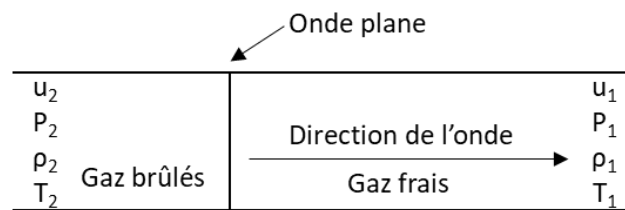


Figure I-26 : Représentation schématique d'une onde plane stationnaire à une dimension dans un conduit

La théorie de Chapman et Jouguet a permis d'établir, à partir des équations d'aérothermodynamique, la méthode de calcul des paramètres de la détonation. Les équations d'aérothermodynamique sont les suivantes :

- Equation de la conservation de la masse :

$$m = \rho_1 u_1 = \rho_2 u_2 \quad \text{Eq. I-38}$$

avec :

ρ_1 et ρ_2 sont respectivement les masses volumiques des gaz frais et brûlés

u_1 : la vitesse des gaz frais par rapport à l'onde ; u_2 : la vitesse derrière le choc

- Equation de la conservation de la quantité de mouvement :

$$\rho_1 u_1^2 + P_1 = \rho_2 u_2^2 + P_2 \quad \text{Eq. I-39}$$

Avec :

P_1 : la pression des gaz frais et P_2 : la pression des gaz derrière le choc

- Equation de la conservation de l'énergie :

$$\frac{u_1^2}{2} + h_1 = \frac{u_2^2}{2} + h_2 \quad \text{Eq. I-40}$$

Avec :

h_1 : enthalpie des gaz frais et h_2 : enthalpie des gaz derrière le choc

-Loi des gaz parfaits pour les gaz frais et pour les gaz brûlés :

$$P_1 = \rho_1 R T_1 \quad \text{Eq. I-41}$$

$$P_2 = \rho_2 R T_2 \quad \text{Eq. I-42}$$

Avec :

T_1 et T_2 sont respectivement les températures de gaz frais et de gaz choqués.

La combinaison des Eq. I-38 et Eq. I-39 conduit à l'équation de la droite de Rayleigh :

$$m^2 = \rho_1^2 u_1^2 = \frac{P_2 - P_1}{1/\rho_1 - 1/\rho_2} \quad \text{Eq. I-43}$$

En réarrangeant ces relations, on obtient l'équation d'Hugoniot :

$$h_2 - h_1 = \frac{1}{2} (P_2 - P_1) \left(\frac{1}{\rho_2} - \frac{1}{\rho_1} \right) \quad \text{Eq. I-44}$$

et :

$$q = h_2 - h_1 = (h_2^0 + Cp_2 T_2) - (h_1^0 + Cp_1 T_1) \quad \text{Eq. I-45}$$

où :

Cp_1 : la capacité calorifique des gaz frais et Cp_2 : la capacité calorifique des gaz derrière le choc

L'équation Eq. I-44 permet de tracer la courbe d'Hugoniot des réactifs et des produits de la réaction pour différents degrés d'avancement. La Figure I-27 montre la représentation de la courbe d'Hugoniot des produits, qui est la base de la détermination numérique de la vitesse de Chapman et Jouguet.

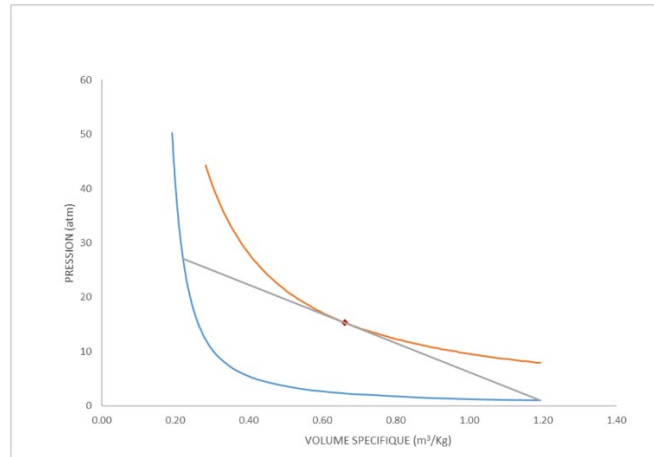


Figure I-27 : Représentation la droite de Rayleigh (la droite en grise), la courbe d'Hugoniot des réactifs (courbe en bleue) et produits (courbe en orange)

Comme le montre la Figure I-27, la courbe en orange correspond à la courbe d'Hugoniot des réactifs et les produits celle en bleue. Le point en rouge qui est à l'intersection de la droite de Rayleigh et la courbe d'Hugoniot des produits représente le point de Chapman-Jouguet, noté CJ.

Dans les coordonnées du laboratoire, l'onde de détonation se déplace à la vitesse V_{CJ} alors que les gaz se déplacent aux vitesses V_1 et V_2 . Il vient :

$$V_1 = V_{CJ} - u_1 = 0 \quad \text{Eq. I-46}$$

$$V_2 = V_{CJ} - u_2 \quad \text{Eq. I-47}$$

$$V_2 = u_1 - u_2 > 0 \quad \text{Eq. I-48}$$

Dans la théorie de Chapman Jouguet et dans le référentiel de l'onde de détonation, le gaz derrière l'onde se déplace à la vitesse du son dans les gaz brûlés.

3.2 Théorie de Zeldovich, Von Neumann et Döring

La théorie de ZND considère l'onde de détonation comme un couplage d'une onde de choc et d'une zone réactionnelle séparées par une longueur d'induction se déplaçant à la vitesse de Chapman-Jouguet. Dans ce modèle, les réactions chimiques dans les gaz choqués se produisent après un délai appelé délai d'auto-induction. L'évolution du processus de détonation, selon la théorie de ZND est représentée sur la Figure I-28.

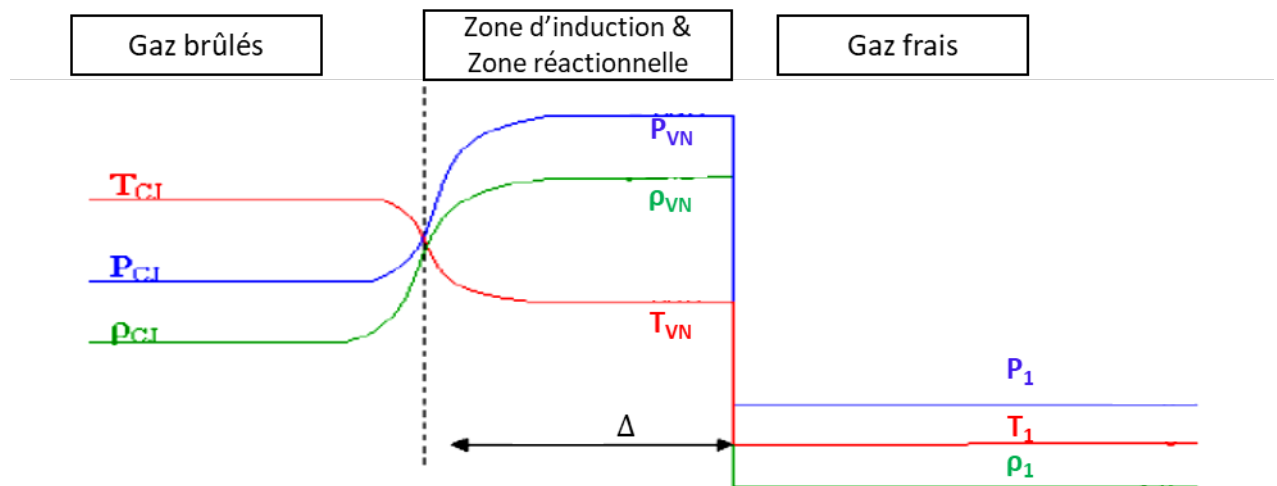


Figure I-28 : Profils de température, pression et masse volumique selon le modèle ZND, tiré de (Coudoro 2012)

Comme on peut le voir sur la Figure I-28, les gaz frais à l'état 1 subissent une compression adiabatique les portant à des conditions de haute température et de haute pression appelées aussi conditions de Von Neumann (T_{VN} , P_{VN}). Le point Von Neumann correspond à l'intersection entre la courbe d'Hugoniot des réactifs et la droite de Rayleigh tangentes à la courbe d'Hugoniot des produits.

Les concepts ZND, considérant la structure de l'onde unidimensionnelle, ne rend pas compte des observations expérimentales mettant en évidence une structure tridimensionnelle.

3.3 La structure tridimensionnelle de la détonation

La structure réelle de l'onde de détonation est plus complexe que celle décrite par le modèle de ZND. Les observations expérimentales révèlent une structure tridimensionnelle et instationnaire du front de détonation représentée sur la Figure I-29.

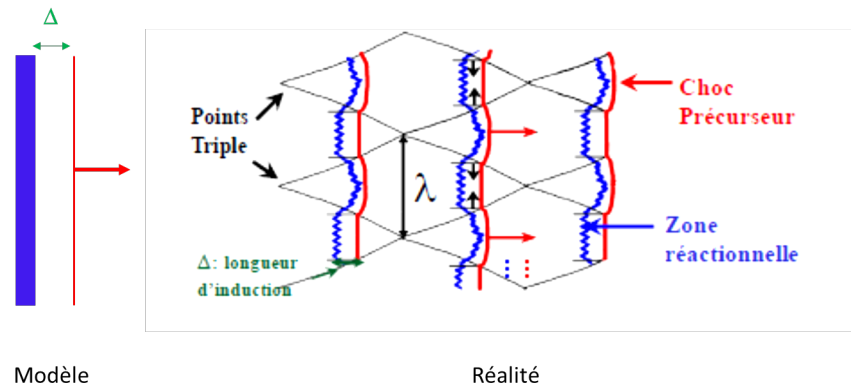


Figure I-29 : Structure réelle de l'onde de détonation, tirée de (Coudoro 2012)

La structure tridimensionnelle montrée sur la Figure I-29 peut être visualisée en insérant une feuille recouverte de suie sur la paroi du tube. Lorsqu'une onde de détonation se propage dans le mélange explosif, les points de collisions d'ondes appelés points triples impriment sur les parois noircies leur trajectoire en forme de losanges. Les points triples se forment lors de la rencontre des ondes de choc à propagations longitudinales (onde incidente et onde de Mach) et des ondes transversales (ondes réfléchies). Ces structures sont communément appelées cellules de détonation (Denisov et Troshin 1962) et caractérisées par une dimension de longueur notée λ (largeur de la cellule).

La largeur λ dépend de la composition du mélange (nature, rapport d'équivalence, dilution) et des conditions initiales de pression et de température. La détermination expérimentale de ce paramètre permet de caractériser la sensibilité à la détonation d'un mélange réactif qui augmente quand λ devient petit. Westbrook et Urtiew (Westbrook et Urtiew 1982) ont trouvé des relations empiriques liant λ à certaines caractéristiques de la détonation. L'une d'entre elles établit une corrélation linéaire entre la taille de cellule λ et la longueur d'induction Δ .

$$\lambda = k \cdot \Delta \quad \text{Eq. I-49}$$

Avec :

λ : la taille de la cellule (m)

k : constante sans dimension

Δ : longueur d'induction (m)

Pouvant reliée au délai d'auto-inflammation τ derrière l'onde de choc par la relation :

$$\Delta = \tau \cdot (D_{CJ} - u_2) \quad \text{Eq. I-50}$$

Avec :

D_{CJ} : vitesse de Chapman-Jouguet (m.s^{-1})

u_2 : vitesse des particules derrière l'onde de choc (m.s^{-1})

τ : délai d'auto-inflammation (s)

Le délai d'auto-inflammation τ est déterminé par la modélisation cinétique chimique de la réaction dans les conditions de pression et de température de Von Neumann (T_{VN} et P_{VN})

Pour les hydrocarbures légers dans l'air ou dans le dioxygène (O_2), k est proche de 29.

$$\lambda = 29\Delta \quad \text{Eq. I-51}$$

A partir de cette relation, on peut dire qu'il y a un couplage facile entre la zone réactionnelle et l'onde de choc. Quand les cellules de détonation ont des petites dimensions, le délai d'auto-inflammation est court derrière l'onde de choc.

3.4 Modes d'initiation de la détonation dans les tubes

Une détonation dans un tube d'un mélange réactif peut être initiée selon deux processus distincts :

1. la Transition-Choc-Détonation (TCD) qui se produit avec une onde de choc suffisamment intense permettant d'avoir des délais d'auto-inflammation très courts pour entretenir la détonation.
2. la Transition-Déflagration-Détonation (TDD), qui se produit lors d'une forte accélération de la flamme en présence d'obstacles.

La propagation d'une détonation auto-entretenu au sein d'un tube équipé d'obstacle comme représenté sur la Figure I-30 peut uniquement se produire si la configuration géométrique répond à certains critères.

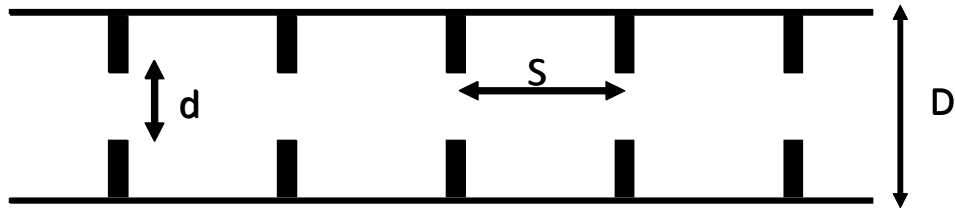


Figure I-30 : Exemple d'un schéma d'un tube muni d'obstacles avec d : le diamètre de l'obstacle pour les sections cylindriques ou la largeur pour les sections rectangulaires (mm) ; S : le pas (mm) et D : le diamètre du tube (mm), tiré de (Sorin 2006)

Un des critères d'existence d'une détonation auto-entretenu est de comparer la dimension géométrique du tube à la largeur de la détonation λ . Ce critère a été formulé par deux équipes différentes de deux manières distinctes :

d'après Peraldi et al. 1986 (Peraldi, Knystautas et Lee 1986)

$$d \geq \lambda \quad \text{Eq. I-52}$$

d'après Dorofeev et al. 2000 (Dorofeev et al. 2000)

$$\frac{D+S}{2 \cdot \left(1 - \frac{d}{D}\right)} \geq 7 \cdot \lambda \quad \text{Eq. I-53}$$

Dans le cas d'un tube cylindrique lisse, la propagation d'une détonation hélicoïdale est obtenue pour un diamètre interne égal à la largeur de la cellule de détonation divisée par π via l'équation Eq. I-54 suivante :

$$d = \frac{\lambda}{\pi} \quad \text{Eq. I-54}$$

Avec :

D : diamètre interne du tube (mm)

d : diamètre de la section du blocage (mm)

S : le pas (mm)

La détonation hélicoïdale dite marginale engendre la formation sur la surface du tube d'un point triple unique qui suit une trajectoire hélicoïdale.

4 Transition de la déflagration à la détonation

Le processus de Transition-Déflagration-Détonation (TDD) représente un risque majeur dans le milieu industriel en raison des pressions dépassant la pression de Chapman-Jouguet P_{CJ} associée à la détonation dans les conditions initiales des réactifs. Les dégâts sur les structures résultant de ce phénomène sont plus importants et plus destructeurs que dans le cas d'une déflagration. Dans le contexte spécifique de la conception d'un système d'allumage pour les moteurs à détonation pulsée (PDE), le mécanisme de TDD émerge comme la solution optimale pour produire une détonation avec une faible énergie d'initiation. Afin d'optimiser l'efficacité de ce système d'allumage dans un PDE, il est essentiel de diminuer sa taille et d'augmenter considérablement sa fréquence de fonctionnement en réduisant la longueur et la durée de transition (L_{TDD} et t_{TDD}).

L'occurrence de la Transition-Déflagration-Détonation (TDD) est un phénomène complexe étroitement lié à l'accélération de la flamme dans des environnements confinés. L'expansion des produits de la combustion crée un mouvement de chasse des gaz frais induisant une augmentation de sa surface et de sa vitesse. Cette dernière est proportionnelle à la surface totale de la flamme A_F et à la vitesse fondamentale de la flamme S_L d'après l'équation suivante :

$$V_F = \kappa \cdot \sigma \cdot S_L \cdot A_F \cdot T_f^\beta \cdot e^{-\frac{E}{R \cdot T_f}} \quad \text{Eq. I-55}$$

Avec :

κ : taux d'étirement (s^{-1})

σ : facteur d'expansion sans unité

A_F : surface de la flamme (m^2)

V_F : Vitesse de flamme ($m.s^{-1}$)

T_f : température de flamme (K)

E : énergie d'activation ($J.mol^{-1}$)

L'augmentation de la surface de la flamme est engendrée par la turbulence ou des plissements dus aux instabilités naturelles de la flamme.

4.1 Instabilités de la flamme

On identifie quatre types d'instabilités : les instabilités hydrodynamiques dites de Darrieus-Landau, les instabilités thermo diffusives dites de Zeldovich, les instabilités dues à l'accélération dites de Raighleigh-Taylor et les instabilités de Kelvin-Helmholtz.

4.1.1 Instabilités hydrodynamiques, dites de Darrieus-Landau :

Ces instabilités sont induites dans les flammes de pré-mélange laminaire par l'expansion des gaz brûlés comme illustré sur la Figure I-31.

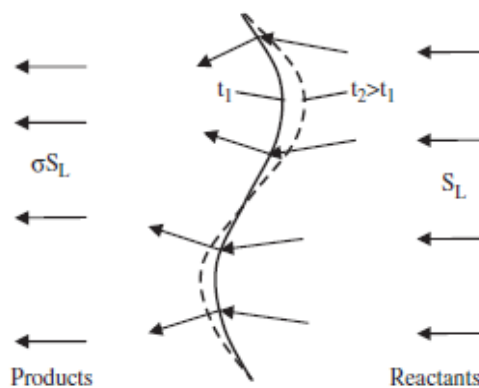


Figure I-31 : Schéma de l'instabilité de Darrieus-Landau. Les formes de flammes à deux instants t_1 et t_2 sont montrées. Schéma tiré de (Ciccarelli et Dorofeev 2008)

Comme le montre la Figure I-31, la légère courbure de la flamme entraîne une convergence des lignes de champ dans les gaz brûlés derrière les parties convexes du front et une divergence derrière les parties concaves. Ce mécanisme, découvert indépendamment par Darrieus et Landau ne se produit que de manière exponentielle.

4.1.2 Instabilités thermo-diffusives, dite de Zel'dovich :

Il est essentiel de considérer, en plus des instabilités de Darrieus-Landau, les instabilités liées à la diffusion thermique et massique à travers le front de flamme. Elles sont schématisées sur la Figure I-32.

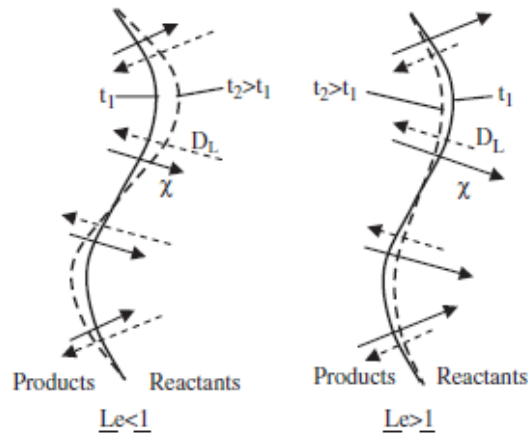


Figure I-32 : Schéma de l'instabilité de Darrieus-Landau. Les formes de flammes à deux instants t_1 et t_2 sont affichées. La flamme se propage de gauche à droite, tiré de (Ciccarelli et Dorofeev 2008)

Comme le montre la Figure I-32, lorsque la diffusion des espèces est inférieure à la diffusion de chaleur ($Le > 1$), la température diminue derrière la partie convexe du front de flamme en raison de la réduction de la diffusion massique de l'espèce minoritaire et de l'augmentation de la perte de chaleur, ce qui entraîne une diminution locale de la vitesse de combustion. Dans les parties concaves de la flamme, on observe l'effet inverse : la température locale de combustion augmente, ce qui entraîne une augmentation locale de la vitesse de combustion. Comme indiqué dans la Figure I-32, ces deux effets ont tendance à lisser la flamme. Lorsque, $Le < 1$, l'effet inverse est observé.

4.1.3 Instabilités due à l'accélération, dite de Rayleigh-Taylor :

Ce mécanisme se manifeste à l'interface de deux gaz présentant des densités différentes et soumis à une accélération de l'interface dirigée vers le gaz le moins dense, en l'occurrence les gaz brûlés dans le cas d'une flamme. Ce phénomène d'instabilité est observé avec des flammes qui se propagent du bas vers le haut ou lorsqu'elles sont soumises à une onde sonore ou une onde de choc.

4.1.4 Instabilités de Kelvin-Helmoltz :

Elles reflètent l'impact de la viscosité du fluide sur l'interface réactive et peuvent engendrer des tourbillons au sein du front de flamme.

4.2 Effet des ondes de compression sur l'accélération de flamme

Selon Kerampran 2000, la longueur du tube conditionne la transition de la déflagration à une détonation. Les ondes de compression et de détente de part et d'autre du front de flamme induisent un écoulement dans les gaz frais qui provoque une brusque accélération de la flamme. L'augmentation de la vitesse de la flamme est susceptible de déclencher la TDD si la longueur du tube est suffisamment long. Ce processus est schématisé sur la Figure I-33 suivante.

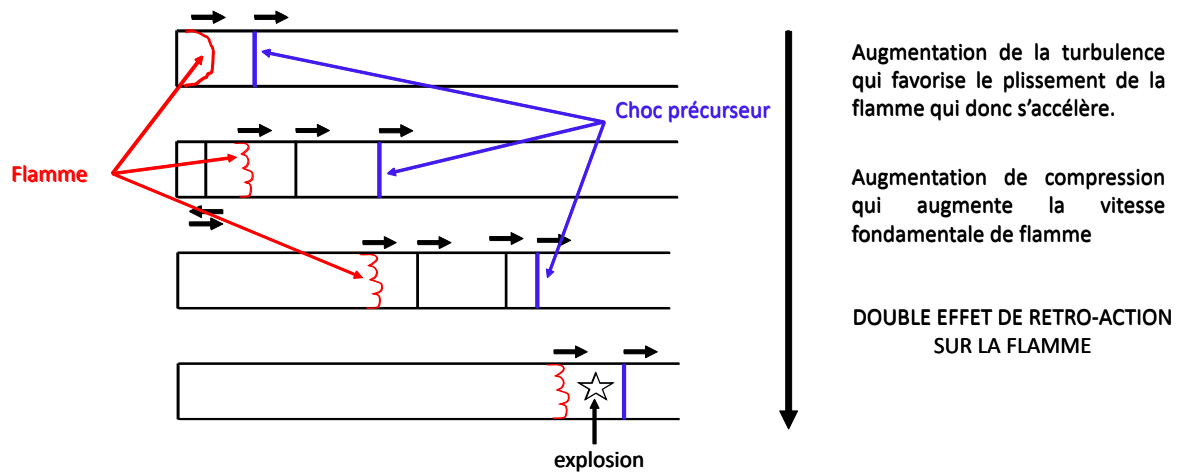


Figure I-33 : Processus de la TDD dans un tube lisse, tiré de (Sorin 2006)

4.2.1 Fonction des obstacles dans la TDD

Shchelkin et Troshin (1963) ont été les premiers à étudier l'impact de la présence d'obstacles répétitifs dans un tube sur la longueur de transition d'une déflagration vers une détonation. D'après Sorin (Sorin 2006), ces obstacles interviennent sur deux mécanismes d'accélération de la flamme : la création et le renforcement de la turbulence, ainsi que la génération d'ondes de choc, comme illustré sur la Figure I-34.

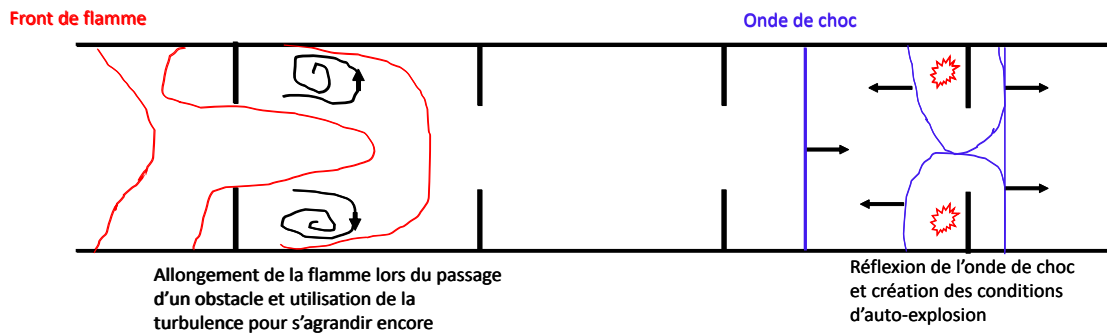


Figure I-34 : Schématisation du comportement du front de flamme et des chocs interagissant avec un obstacle dans un tube tirée de (Sorin 2006)

D'après la Figure I-34, dans un 1^{er} temps, ce sont les ondes de compression d'amplitude faible qui entrent en interaction avec les obstacles et engendrent les instabilités au sein du front de la flamme.

La présence des obstacles dans le tube réduit localement la section. Cette section locale et la section du tube sont liées par un rapport, appelé rapport de blocage BR :

$$BR = 1 - \left(\frac{d}{D}\right)^2 \quad \text{Eq. I-56}$$

Avec : BR sans unité, d : diamètre de la section (mm) et D : diamètre i du tube (mm)

Pour un rapport de blocage et une longueur du tube donnés, le nombre d'obstacles doit être suffisant pour avoir une accélération continue de la flamme et produire une détonation. Dans le cas contraire, on observe une propagation d'une flamme (simple déflagration).

Selon Lee et al., 1984 (Lee, Knystautas, et Freiman 1984) et Teodorczyk et al., 1988 (Teodorczyk, Lee, et Knystautas 1989), quatre régimes différents de la propagation de la flamme sont observées dans les tubes avec des obstacles répétitifs : (1) extinction ou coincement, (2) régime choqué, (3) quasi-détonation, ou (4) détonation stable.

La Figure I-35 montre une série de photos sur la propagation de flamme pour un mélange de 70% H₂-air avec BR=0,6. Le temps et la distance au point d'allumage sont indiqués au-dessus de chaque image (Kuznetsov et al. 1999).

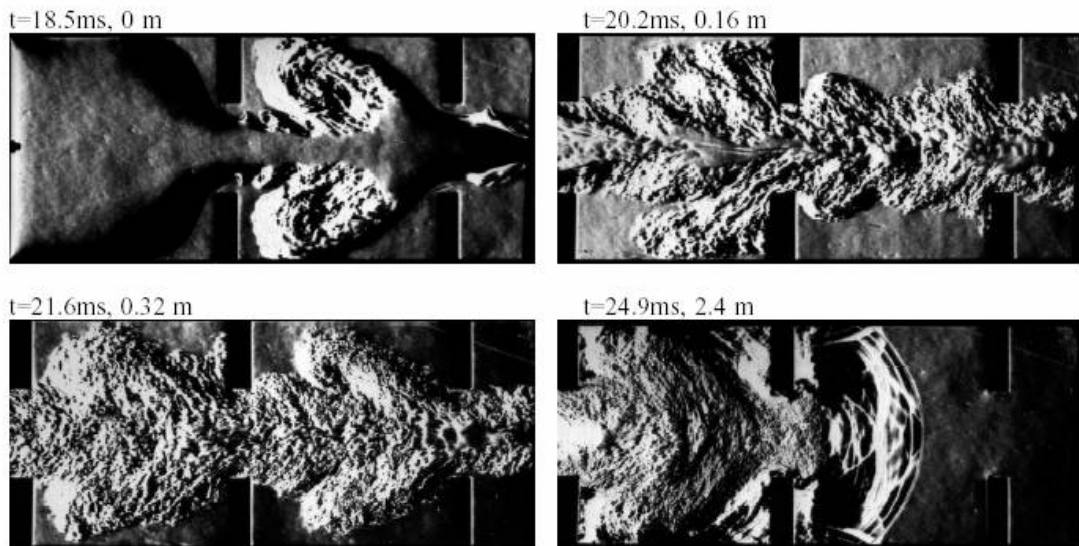


Figure I-35 : Série de photos sur la propagation de flamme pour un mélange de 70% H_2 -air avec $BR=0,6$. Le temps et la distance au point d'allumage sont indiqués au-dessus de chaque image, tirées de (Kuznetsov et al. 1999).

Sur la Figure I-35, une flamme se forme au début du tube, affichant une texture lisse ou légèrement plissée due aux instabilités thermo-diffusives combinées aux phénomènes de Darrieus-Landau. Le passage des obstacles le long du tube provoque une expansion rapide de la surface de la flamme. L'amplification de la surface de la flamme est due à l'expansion des gaz brûlés qui induit un déplacement des gaz frais autour des obstacles et se traduit par une accélération continue de la vitesse de la flamme.

L'accélération d'une flamme peut être obtenue avec d'autres dispositifs tels que :

- La Spirale de Shchelkin (voir chapitre 2),
- L'injection de gaz brûlés au travers de plateaux percés (Knystautas *et al.* (Knystautas et al. 1979)),
- Les préchambres de turbulence,
- L'amorçage après la réflexion du choc précurseur,
- La création de radicaux *in situ* par décharges électriques.

4.2.2 Etudes antérieures pertinentes sur la détonation pour le propane

Penyazkov (Penyazkov et al. 2005) a réalisé des expériences dans un tube à choc de 50 mm et de 8,5 m de longueur pour déterminer le délai d'auto-inflammation derrière l'onde de choc réfléchi du propane dans l'air à différentes richesses (Penyazkov et al. 2005) pour valider les mécanismes réactionnels et pour estimer la limite de détonabilité.

Silvestrini et al. (Silvestrini et al. 2008) ont proposé des formules simplifiées pour l'évaluation de la vitesse de la flamme et de la distance parcourue avant la transition de déflagration à détonation. Ces formules tiennent compte à la fois de tubes lisses et de tubes remplis d'obstacles. Ces formules ont été validées à l'aide des données de la littérature dans le cas de l'hydrogène, du méthane, de l'éthylène et du propane

Plus tard, Liu et al. (S. Liu et al. 2021) ont étudié expérimentalement le comportement de l'initiation et de la propagation de l'onde de détonation du mélange propane/oxygène/azote pour déterminer la taille des cellules de détonation pour différentes conditions initiales. Les résultats montrent que la taille de la cellule augmente, pour un mélange stœchiométrique, avec le rapport de dilution ($\beta = \frac{X_{N_2}}{X_{O_2}}$).

Pinard et al. (Pinard, Higgins, et Lee 2004) ont réalisé une étude sur l'impact de l'ajout de NO₂ sur la taille de la cellule de détonation (λ) et la distance de transition déflagration-détonation (X_{TDD}) pour le mélange $C_3H_8 + 5 (O_2 + \beta N_2)$ avec diverses dilutions β . Ils ont conclu que la longueur de transition (X_{TDD}) augmente exponentiellement avec la dilution ($\beta = N_2/O_2$) et que l'ajout de NO₂ n'impacte pas la taille de la cellule de détonation (λ) et la distance de transition déflagration-détonation (X_{TDD}).

Conclusion

L'idée d'appliquer la détonation chimique aux systèmes de propulsion existe depuis plus de cinquante ans. Ce concept est particulièrement captivant en raison de l'augmentation significative de l'efficacité du moteur par rapport aux systèmes conventionnels utilisant la combustion déflagrante. De nombreuses propositions ont été faites pour améliorer l'efficacité globale et simplifier la conception des systèmes de propulsion utilisant la détonation. L'amélioration principale de ces systèmes porte sur la maîtrise des conditions initiales pour obtenir, sur une très courte distance, une vitesse de réaction rapide et une montée significative de la pression par rapport à la pression initiale. Cette amélioration permet de concevoir des chambres de combustion compactes.

Dans le cas des RDE, la plupart des recherches sont orientées vers l'utilisation de ce système dans la propulsion de fusées et on note aussi l'existence des études sur l'utilisation des RDE dans les turbopropulseurs.

Actuellement, il est clair qu'il n'y a aucune limitation fondamentale dans l'utilisation de la détonation pulsée. Les propulseurs à détonation pulsée (PDE) ont une efficacité considérablement supérieure à celle des propulseurs conventionnels, notamment lors de vols subsoniques et à basses altitudes. Les avantages supplémentaires d'un PDE idéal sont la simplicité de conception et un faible poids. On note que la transition déflagration-détonation (TDD) est considérée comme l'une des approches les plus prometteuses pour initier la détonation dans le PDE.

Les connaissances sur le phénomène de détonation, au cœur du cycle de fonctionnement du PDE restent limitées et des recherches approfondies sont nécessaires pour développer un système PDE fiable. Le défi réside dans la nécessité d'obtenir des données expérimentales et des propriétés critiques des détonations dans des conditions de vol. Des recherches plus approfondies sont nécessaires pour comprendre l'impact des paramètres critiques tels que le remplissage de la chambre de combustion, le bruit et les vibrations, la durabilité à la fatigue, le transfert de chaleur, le choix de conceptions de buses optimales et le contrôle du fonctionnement.

Le présent travail a pour objectif d'apporter une étude complète sur l'initiation de la détonation dans les PDE et le comportement des flammes du carburant choisi.

Chapitre II — Dispositifs expérimentaux, méthodologies et outils numériques

Dans ce chapitre, les dispositifs expérimentaux utilisés dans le cadre de cette thèse sont présentés. Il s'agit d'une bombe sphérique et d'un tube à choc qui peut être configuré pour étudier la Transition-Choc-Détonation (TCD) ou la Transition-Déflagration-Détonation (TDD). Grâce à ces dispositifs, les paramètres fondamentaux des flammes laminaires ainsi que les propriétés de détonation des mélanges à base de propane, propane- $\text{C}_3\text{H}_7\text{NO}_3$ (Nitrate d'isopropyle ou IPN), $\text{C}_3\text{H}_7\text{NO}_3$ (Nitrate d'isopropyle ou IPN) et propène C_3H_6 ont été déterminés. Les outils numériques utilisés pour la détermination des paramètres fondamentaux sont enfin présentés.

1 Etude de la propagation des flammes laminaires

La bombe sphérique est un dispositif expérimental utilisé pour la caractérisation et la détermination des paramètres fondamentaux de combustion. Il s'agit d'une chambre de combustion rigide qui permet la détermination, pour un mélange donné et en fonction de sa composition, des limites d'inflammabilité ainsi que des vitesses de flammes laminaires et turbulentes.

1.1 Description de la bombe sphérique

La bombe sphérique utilisée dans ce travail est la bombe SF2 (Spherical Flame Facility), de volume 56 L, mise au point à ICARE en 2008 dans le cadre de la thèse de Jules Goulier (GOULIER 2015). Cette enceinte est constituée de deux sphères concentriques (Figure II-1) entre lesquelles circule un fluide caloporteur permettant de maintenir la température constante à une valeur maximale de 473 K. La sphère interne a un diamètre de 476 mm et est conçue pour fonctionner à une pression maximale de 5000 kPa. Afin de minimiser les réflexions multiples d'émission lumineuse à l'intérieur de l'installation, la paroi interne a été traitée avec un revêtement appelé EBONOL®, qui lui confère une couleur noire. La seconde enveloppe, située à l'extérieur de la sphère interne, a un diamètre externe de 500 mm et peut supporter une pression de service de 300 kPa. La sphère interne est équipée de nombreux bossages, comme illustré sur la Figure II-2.



Figure II-1 : Vue éclatée de la bombe sphérique de 56 L avec les deux sphères concentriques

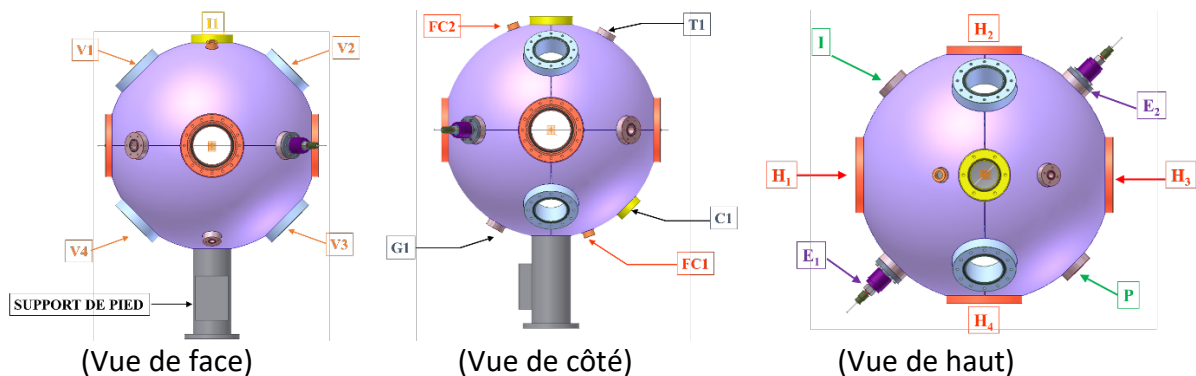


Figure II-2 : Vues de la bombe sphérique de 56 L munie de ses différents bossages

Ces bossages (Figure II-2) ont différentes fonctions :

- L'observation de la propagation de la flamme est permise au travers de quatre hublots (Vue du haut, H1 à H4) de 120 mm de diamètre et de 30 mm d'épaisseur, qui sont diamétralement opposés deux à deux. Ces hublots permettent un passage optique de 97 mm.
- L'allumage du mélange est réalisé au moyen d'un arc électrique généré par la connexion de deux électrodes en tungstène (Vue du haut, E1 et E2), montées le long du diamètre de la sphère, connectées à un générateur de haute tension.
- Le suivi de la pression grâce à un capteur de pression Kistler de type 601A (Vue de côté, C) permettant de mesurer les variations de pression tout au long du processus de combustion du mélange gazeux.
- La mesure de la température interne est réalisée grâce à un thermocouple (Vue de côté, T1 ou T2) installé sur le côté de l'enceinte. Ce dispositif permet d'obtenir des mesures

précises de la température à l'intérieur de l'enceinte pendant l'expérience, en particulier la température initiale du mélange.

- L'introduction des gaz frais est connectée au bossage (Vue de haut, I), tandis que le pompage des gaz brûlés est connecté au bossage (Vue de haut, P).
- La circulation du fluide caloporteur (Vue de côté, FC1 et FC2) est établie grâce à un dispositif de régulation thermique appelé "squid". Ce système de régulation permet de maintenir la température initiale du fluide caloporteur à un niveau constant, assurant ainsi des conditions stables pour les expériences
- Enfin, la vue de face montre l'existence de quatre bossages, V1 à V4 permettant l'installation de ventilateur permettant de mesurer des vitesses de flammes turbulentes. Aucun ventilateur n'a été installé dans le cadre de cette thèse puisque seules des flammes laminares ont été étudiées.

1.2 Préparation des mélanges

L'ensemble de l'installation est connecté à deux pompes à vide primaire d'une capacité de $20 \text{ m}^3 \cdot \text{h}^{-1}$ chacune. Ces pompes sont équipées de moteurs antidéflagrants permettant d'atteindre une pression résiduelle de 12 Pa à l'intérieur de la bombe. Les mélanges sont préparés directement dans l'installation en utilisant la méthode de la pression partielle. Les gaz, tels que le propane (C_3H_8) et le propène (C_3H_6) de pureté supérieure à 99,5%, ainsi que l'air (mélange de 0,209% O_2 + 0,791% N_2 en proportion volumique) d'une pureté supérieure à 99,9999% sont fournis par AIR LIQUIDE. L'isopropyle de nitrate (IPN, $\text{C}_3\text{H}_7\text{NO}_3$) est fourni par SIGMA-ALDRICH et FISHER SCIENTIFIC avec une pureté supérieure à 98%. Chaque constituant du mélange cible est introduit individuellement dans l'enceinte jusqu'à atteindre la pression désirée. Les composants sont introduits dans l'ordre croissant de leur pression partielle. La mesure de chaque pression partielle est effectuée à l'aide de deux manomètres capacitifs MKS® de type 631. Ces manomètres offrent deux plages de mesure : la première de 0 à 13 kPa et la deuxième de 0 à 133 kPa. Après le processus de remplissage, les mélanges sont laissés au repos pendant 5 minutes afin d'éliminer toute turbulence. Les expériences sont réalisées avec des mélanges C_3H_8 /air, IPN/air, 10% C_3H_8 -90% IPN/air et C_3H_6 /air, à une pression initiale P_0 de 100 kPa et des températures initiales T_0 de 298 K et 373 K. Pour obtenir des résultats d'une grande précision, les expériences sont menées en maintenant une pression initiale P_0 à

plus ou moins 0,1 kPa, une température initiale T_0 à plus ou moins 1 K et une composition du mélange exprimée en rapport d'équivalence (ER) à plus ou moins 0,1 %.

S'agissant de l'IPN, liquide à température ambiante, il est placé dans un flacon, puis plongé dans un bain d'azote liquide afin de refroidir l'IPN jusqu'à solidification. Ensuite, après avoir éliminé tout l'air présent dans le flacon par pompage, on place ce dernier dans un four pour sublimer l'IPN en phase gazeuse. Enfin, l'IPN, à l'état gazeux, est directement injecté dans la bombe.

1.3 Système d'allumage

Le schéma du système d'allumage est présenté sur la Figure II-3.

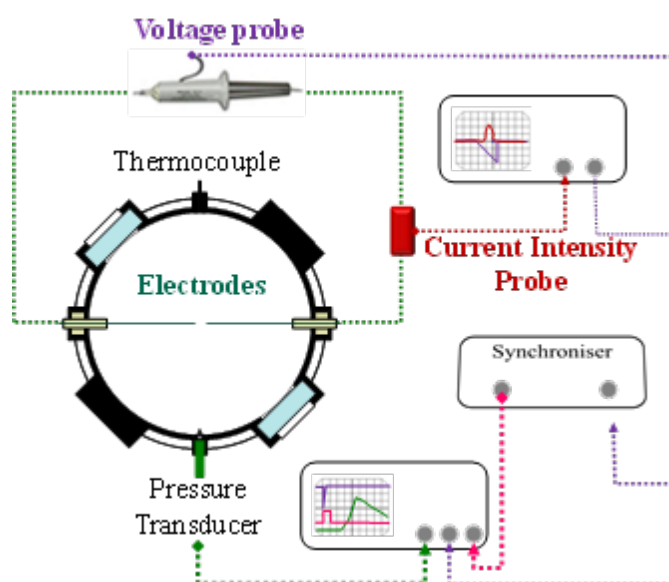


Figure II-3 : Schéma du système d'allumage couplé à la bombe sphérique

Comme cela est indiqué sur la Figure II-3, pour générer l'inflammation du mélange, un couple d'électrodes en tungstène est utilisé avec un diamètre d'environ 1 mm, monté sur le plan équatorial de la bombe (Figure II-2, Vue du haut, E1 et E2). Ces électrodes sont connectées à une source haute tension permettant de produire un arc électrique. La source est composée d'un condensateur de capacité de 1,5 μF et d'une tension de 1,3 kV, capable de stocker une énergie de 1,31 J. Afin de mesurer l'énergie fournie au mélange gazeux ($E = \int |U \cdot I| dt$), le courant I et la tension U sont mesurés respectivement à l'aide d'une sonde de courant Bergoz CT-D1.0-B et d'une sonde de tension Tektronix P6015A. La distance entre les électrodes varie généralement entre 1 et 5 mm en fonction des fractions molaires du carburant. Sur une

moyenne de 100 étincelles, l'énergie moyenne délivrée est d'environ 1,82 mJ, avec une dispersion de 0,48 mJ selon le mélange réactionnel considéré. Lorsque l'étincelle se produit, elle déclenche simultanément la mesure de la pression, de la tension, du courant et de la caméra à l'aide de l'oscilloscope (Agilent DSO-100MHz, 2Gsa/s) et d'un générateur TTL, assurant ainsi la synchronisation des images avec l'évolution de la pression de combustion à l'intérieur de la chambre.

1.4 Diagnostics associés

1.4.1 Mesure de la pression dynamique

Pour mesurer la pression à l'intérieur de la sphère, un bossage d'un diamètre de 26 mm est incorporé (Figure II-2, Vue de côté C). Ce bossage est spécifiquement conçu pour accueillir un capteur de pression piézoélectrique, positionné à 40° du plan équatorial sur la partie supérieure de la sphère. Le capteur utilisé est un Kistler de type 601A, qui possède une fréquence propre de 150 kHz et permet de mesurer des pressions de combustion allant jusqu'à 25000 kPa. Comme expliqué précédemment, la pression des gaz à l'intérieur de l'enceinte est mesurée à l'aide de deux manomètres capacitifs de type MKS® 631. Ces manomètres sont calibrés à l'aide d'un manomètre à mercure en U, en association avec une pompe à vide secondaire. Il convient de noter que dans nos expériences, à la fin de l'observation de la zone d'expansion de la flamme, le volume brûlé représente environ 0,8 % du volume total de la cuve, et la pression reste constante pendant la visualisation de la propagation de la flamme, comme le montre la Figure II-4. Le mélange peut être considéré comme isobare et adiabatique (pas de perte de chaleur aux parois).

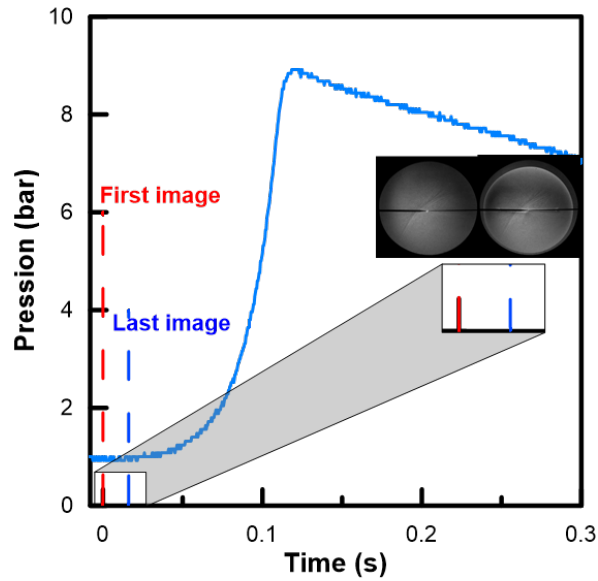


Figure II-4 : Exemple d'un profil de pression (en bleu) pour le mélange C_3H_6 /air à $ER = 0,9 \pm 0,1\%$;
 $T_0 = 300 \pm 1$ K, $P_0 = 100 \pm 0,1$ kPa

La Figure II-4 présente le profil de la pression dynamique de la flamme en fonction du temps. Entre la première et de la dernière image de la flamme, la flamme se propage à pression constante. Par conséquent, la masse volumique des gaz brûlés, ρ_b , peut être considérée comme constante. Il est ainsi possible de déduire la vitesse laminaire S_L° à étirement nul à partir de la vitesse spatiale de propagation de la flamme V_s° à étirement nul (en $cm.s^{-1}$) par l'équation 33 du chapitre suivant :

$$S_L^\circ = V_s^\circ / \sigma$$

Dans laquelle σ est le coefficient d'expansion du mélange : $\sigma = \rho_u / \rho_b$ où ρ_u , ρ_b correspondent respectivement aux masses volumiques des gaz frais et des gaz brûlés en $cm^3.g^{-1}$. Il n'est pas possible de mesurer expérimentalement la masse volumique des gaz brûlés, mais cette grandeur peut être obtenue par un calcul à l'équilibre thermodynamique en conditions isobare et adiabatique.

1.4.2 Visualisation par la technique de striescopie (dite méthode « Schlieren »)

Pour évaluer la vitesse spatiale de propagation de la flamme V_s° , un système optique a été mis en place pour permettre une visualisation à l'intérieur de la bombe. Ce système repose sur le montage dit « Schlieren », également connu sous le nom de méthode de striescopie. Il permet d'observer le déplacement du front de flamme à l'intérieur de la chambre d'explosion.

Cette méthode se fonde sur la déviation des rayons lumineux provoquée par une variation de l'indice de réfraction. Cette variation est due aux changements de masses volumiques des gaz à travers le front de flamme. Grâce à cette méthode, il est possible de suivre en temps réel la position de la flamme à l'intérieur de la bombe sphérique, et ainsi d'observer l'augmentation du rayon de la flamme en fonction du temps.

Le système optique utilisé est constitué d'une combinaison de plusieurs instruments représentés sur la Figure II-5 :

- une source de lumière : lampe Xénon à arc (Lot-Oreil, model compact 150 W Xe);
- une lentille achromatique (200 mm de focale) située après la source lumineuse ;
- deux miroirs hémisphériques, de 150 mm de diamètre, de 1 m de focale placés de part et d'autre de la bombe sphérique ;
- un diaphragme à iris de diamètre variable placé au point focal du premier miroir hémisphérique ;
- une pastille opaque, du même diamètre que le diaphragme, placée au point focal du second miroir hémisphérique ;
- un écran et une caméra rapide situés en aval de la pastille opaque.

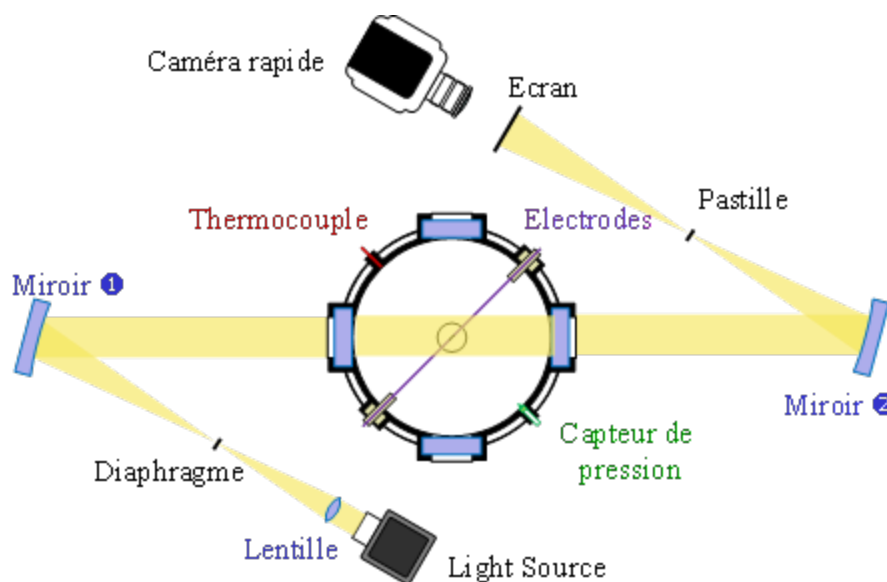


Figure II-5 : Schéma d'un système optique de type Schlieren

Comme le montre la Figure II-5, le système optique utilisé est un montage en forme de Z. Le faisceau lumineux provenant de la source est focalisé au niveau du diaphragme, puis rendu parallèle après réflexion sur un premier miroir sphérique concave de rayon de courbure

1m. Ce faisceau lumineux parallèle traverse la bombe sphérique avant d'être à nouveau focalisé par un second miroir sphérique identique au premier. La qualité et la visualisation du front de flamme sont assurées par une pastille opaque placée au point focal du deuxième miroir, permettant de bloquer la majorité des rayons non déviés par la flamme. Seuls les rayons déviés sont transmis vers le dispositif d'acquisition d'images. La propagation de la flamme est enregistrée à l'aide d'une caméra ultra-rapide (Ametek, Phantom camera). Deux modèles de caméras (Phantom V1610 et Phantom V1611) ont été utilisées dans cette étude, selon leur disponibilité. Dans les deux cas, le format de l'image était fixé à 768 x 768 pixels², permettant d'obtenir des vitesses d'acquisition de 19000 images par seconde, avec un temps d'exposition de 20 μ s. La vitesse d'acquisition a été adaptée au type de flamme à étudier.

1.4.3 Méthodes d'analyse des images Schlieren

Un exemple de séquence d'images enregistrées lors de la combustion du mélange C_3H_8 /air avec un rapport d'équivalence $ER = 1,0$ est présenté sur la Figure II-6. Ces images Schlieren du front de flamme en expansion ont été traitées à l'aide d'un code développé en interne au laboratoire, basé sur la bibliothèque Matlab. Ce code permet de détecter la position du contour du front de flamme dans chaque image. Lorsque la flamme est parfaitement régulière et sphérique, on peut déterminer une ellipse dont le périmètre correspond au contour de la flamme détectée (Figure II-7). Pour chaque image, les deux axes de cette ellipse (le petit axe et le grand axe) sont moyennés afin d'obtenir un rayon de flamme.

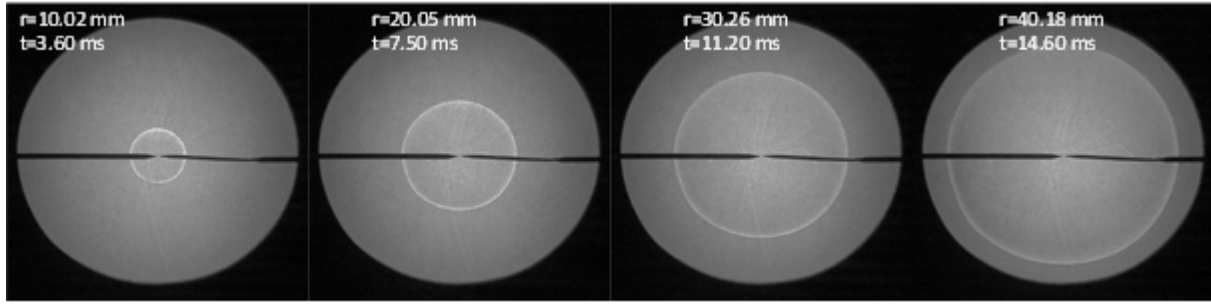


Figure II-6 : Visualisation Schlieren d'une flamme C_3H_8/air ($ER=1$, $T_0=299K$, $P_0=100kPa$)

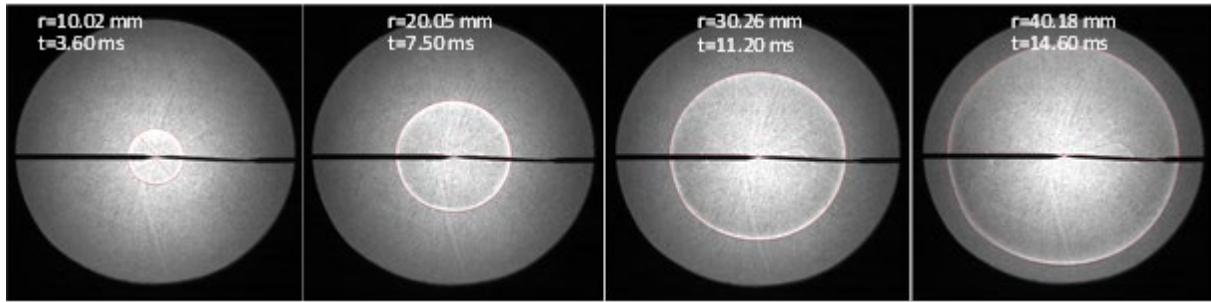


Figure II-7 : Détermination de l'ellipse ayant le même périmètre que la flamme C_3H_8/air observée ($ER = 1$, $T_0 = 299 K$, $P_0 = 100 kPa$)

1.4.4 Détermination de la vitesse de flamme laminaire à étirement nul et de la longueur de Markstein

Comme décrit dans le paragraphe 1.2 du chapitre 3, plusieurs modèles sont mentionnés pour déterminer la vitesse de propagation à étirement nul. Dans le cadre de cette thèse, la relation non linéaire a été choisie et l'équation utilisée est la suivante (Kelley et Law 2009)(Eq.

I-31 du chapitre 1) :

$$\left(\frac{v_s}{v_s^0}\right)^2 \cdot \ln\left(\frac{v_s}{v_s^0}\right)^2 = \frac{2L_b \cdot \kappa}{v_s^0}$$

Un code développé au laboratoire, à l'aide de la bibliothèque Matlab, est utilisé pour résoudre cette équation et comparer les solutions obtenues aux résultats expérimentaux. Dans un premier temps, des valeurs aléatoires sont attribuées à la vitesse laminaire de flamme à étirement nul, S_L^0 et à la longueur de Markstein, L_b . Ensuite, l'équation est résolue et les rayons calculés (liés à l'étirement κ) sont comparés aux rayons obtenus expérimentalement. Si une différence est constatée, de nouvelles valeurs sont attribuées à S_L^0 et L_b , puis l'équation est résolue à nouveau afin d'obtenir une meilleure correspondance. Ce processus est répété de manière itérative, dans le but de minimiser la différence entre les rayons calculés et les rayons expérimentaux. Une fois que la meilleure correspondance est établie, il est possible

d'extrapoler pour obtenir la vitesse de propagation à étirement nul, V_S^0 . Enfin, la vitesse de flamme laminaire à étirement nul est calculée à partir de l'équation (Eq. I-33 du chapitre 1).

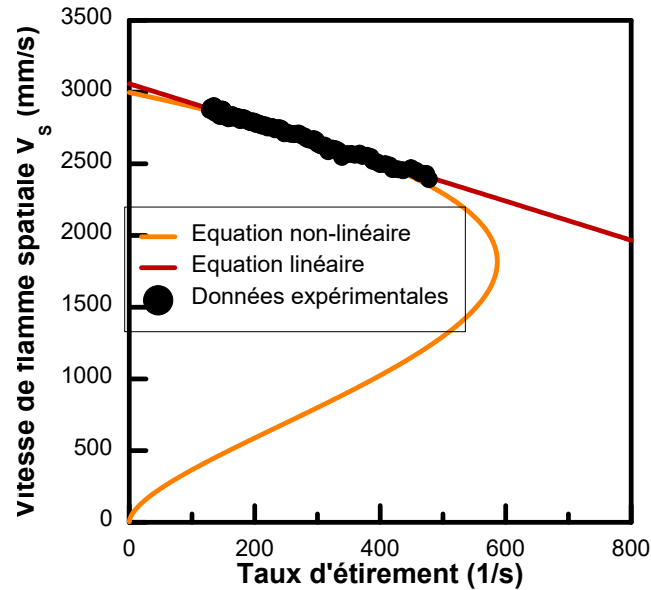


Figure II-8 : Extraction de la vitesse de flamme à étirement nul S_L^0 par l'utilisation de l'équation non linéaire pour une flamme C_3H_8 /air à $ER = 1$, $T_0 = 299$ K, $P_0 = 100$ kPa : Vitesses obtenues à l'aide des rayons expérimentaux

L'analyse, $\left(\frac{V_S}{V_S^0}\right)^2 \cdot \ln\left(\frac{V_S}{V_S^0}\right)^2 = \frac{2L_b \cdot k}{V_S^0}$ sur la détermination de la vitesse de propagation de flamme à étirement nul, a montré que l'écart maximal observé par rapport aux données de la littérature ne dépasse pas 2,5%. En effet, différentes équations (ci-dessous) ont été utilisées pour extrapoler S_L^0 . Les résultats obtenus à partir de chacune de ces équations ont été comparés pour le mélange C_3H_8 /air à 100 kPa, et sont présentés dans la Figure II-9. Il est intéressant de constater que les différences induites sur S_L^0 par l'utilisation de ces différentes méthodes sont négligeables. L'écart maximal observé par rapport à la méthode utilisée dans le cadre de cette thèse est de seulement 2,5%.

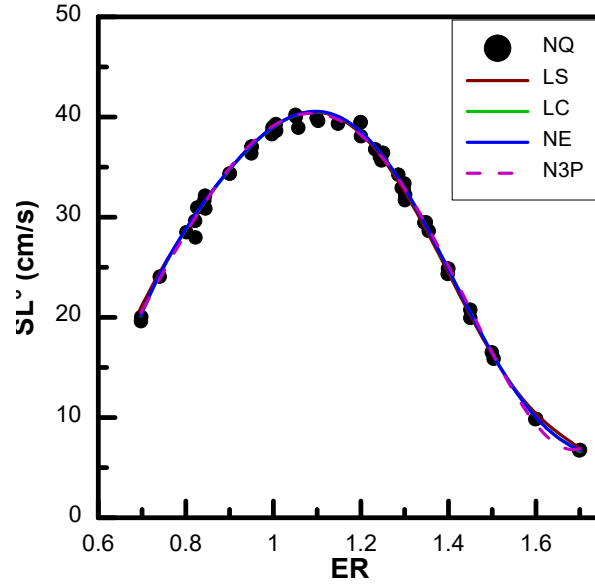


Figure II-9 : Vitesses de propagation à étirement nul obtenues pour une flamme C_3H_8/air ($T_0 = 300K$ et $P_0 = 1$ kPa) via différentes méthodes d'extrapolation (NQ, LS, LC, NE, N3P).

En partant de la relation linéaire d'extrapolation de $V_S = V_S^0 - L_b \cdot k$ (Eq. 37 chapitre 1) généralement exprimée comme suit $S_L = S_L^0 - L_u \cdot k$ (Chen 2010) (Nativel et al. 2016c; Kelley et Law 2009), de nombreux autres modèles d'extrapolation ont été développés sur la base de différentes hypothèses et simplifications (Chen 2011a) (Wu et al. 2015) et ont pu être comparés (Kelley et Law 2009) (Chen 2011b). Il s'agit du modèle linéaire (noté LS), du modèle non linéaire (noté NQ), du modèle linéaire basé sur la courbure (noté LC), modèle non linéaire sous forme d'expansion (noté NE) et modèle non linéaire utilisant 3 paramètres d'ajustement (noté N3P). Ils sont listés ci-dessous :

- Modèle linéaire LS :

$$S_L = S_L^0 - L_u \cdot k \quad \text{Eq. II-1}$$

- Modèle non linéaire NQ :

$$\left(\frac{S_L}{S_L^0}\right)^2 \ln\left(\frac{S_L}{S_L^0}\right)^2 = -\frac{L_u k}{S_L^0} \quad \text{Eq. II-2}$$

- Modèle linéaire basée sur la courbure LC :

$$S_L = S_L^0 - \frac{2L_u}{R_f} \quad \text{Eq. II-3}$$

- Modèle non linéaire sous forme d'expansion NE :

$$\text{NE : } \frac{S_L}{S_L^0} \left[1 + \frac{2L_u}{R_f} + \frac{4L_u^2}{R_f^2} + \frac{16L_u^3}{3R_f^3} + \left(\frac{L_u}{R_f}\right)^4 \right] = 1 \quad \text{Eq. II-4}$$

- Modèle non linéaire utilisant 3 paramètres d'ajustement N3P :

$$\text{N3P} : \frac{S_L}{S_L^0} = 1 - \left(\frac{2L_u}{R_f} \right) + \left(\frac{C}{R_f} \right) \quad \text{Eq. II-4}$$

2 Etude des transitions Choc-Détonation et Déflagration-Détonation

Le tube à choc est le dispositif de choix pour générer des ondes de choc et des ondes détonations. Il a été mis au point par Paul Vieille en 1899 pour étudier le processus d'égalisation de pression. Les premières études de cinétique chimique à haute température datent des années 1960. Le tube à choc est toujours actuellement employé pour déterminer expérimentalement les constantes de vitesses de réactions.

Dans le cadre de cette thèse, le tube à choc a été choisi, d'une part, pour initier la détonation par une onde de choc, appelée TCD (Transition-Choc-Détonation), et, d'autre part, pour accélérer la flamme permettant ainsi l'étude de la transition déflagration-détonation dans un tube équipé d'obstacles.

2.1 Tube à choc

Le tube à choc est illustré sur la Figure II-10.

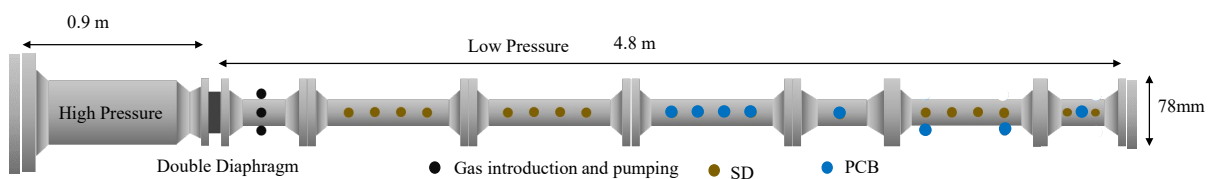


Figure II-10 : Configuration du Tube à choc conçu pour étudier la Transition choc-détonation (TCD)

Comme le montre la Figure II-10, le tube à choc se compose :

- d'une chambre à haute pression (section moteur) de diamètre interne 115 mm et de longueur 0,9 m dans laquelle un gaz inerte est introduit ;
- d'une chambre basse pression (section de travail) un diamètre interne de 78 mm et une longueur de 4,8 m remplie du mélange à étudier.

La pression initiale dans la partie moteur est notée P_4 et la pression dans la section de travail, P_1 . Les deux sections sont connectées à deux pompes primaires permettant d'atteindre une pression inférieure à 1 Pa.

Ces deux sections sont séparées par un volume intermédiaire, démontable, appelé « système à double diaphragme », de diamètre intérieur 78 mm et de longueur de 25 mm. Ce double diaphragme permet d'assurer la bonne répétabilité des paramètres générés par le choc, notamment les conditions thermodynamiques derrière l'onde de choc réfléchi. Le volume du double diaphragme est initialement rempli d'un gaz inerte, généralement de l'hélium, à une pression égale à la moitié de la pression dans la section moteur ($P_4/2$). Les pressions initiales dans la partie moteur (P_4) et dans la section de travail (P_1) sont ajustées en fonction de la pression souhaitée derrière l'onde de choc précurseur.

La section de travail est équipée de vingt-deux capteurs, dont quatorze détecteurs de choc piézoélectriques nommés SD (Type : Chimie-métal) de très petite surface sensible ($0,5 \text{ mm}^2$), espacés à des distances précises. De plus, huit capteurs de pression piézoélectriques nommés PCB (type : PCB 113B24) enregistrent les pressions après le passage de l'onde de choc.

Lors des études de la transition Choc Détonation (TCD), une feuille en polyester de 27 cm de longueur et 21 cm de largeur enduite de suie est déposée sur la paroi intérieure latérale du tube à choc pour mesurer la taille des cellules de détonation.

Les surfaces sensibles des quatorze détecteurs de chocs, SD (Chimie-Métal) et des huit transducteurs de pression PCB (PCB 113B24) sont affleurantes à la paroi interne du tube et sont connectées à sept oscilloscopes via des adaptateurs. Les signaux des détecteurs sont enregistrés sur des oscilloscopes numériques et traités pour déterminer les temps de passage de l'onde de choc ou l'onde de détonation et ainsi calculer leurs célérités.

2.2 Tube de détonation

Dans la configuration de TDD le double diaphragme est retiré et l'ensemble du tube est soumis à la même pression initiale comme le montre la Figure II-11.

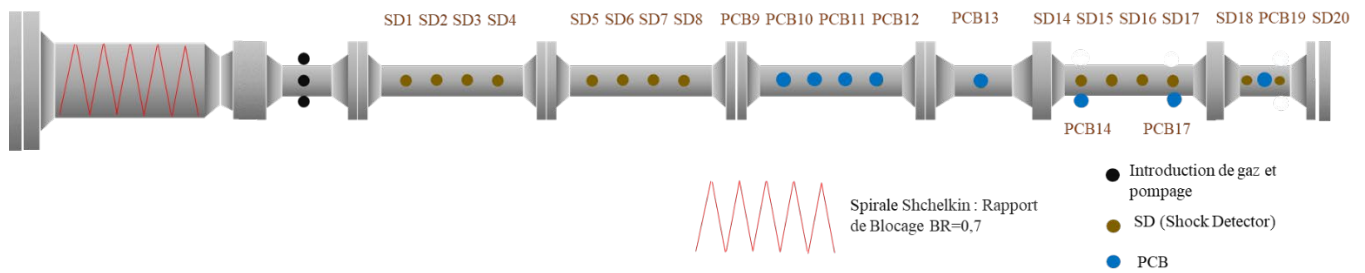


Figure II-11 : Configuration du tube à choc pour TDD

Les premiers à mettre en évidence l'impact de l'état de surface des parois sur la propagation des détonations ont été (Shchelkin.k et Troshin.Y 1963). Ils ont utilisé des tubes en verre avec des fils cylindriques enroulés pour former des spirales de différents pas et diamètres. Grâce à cette méthode, ils ont réussi à obtenir la transition des déflagrations vers des quasi-détonations, caractérisées par un déficit de la vitesse de propagation d'environ 40 à 50% par rapport aux détonations stables (détonations marginales), en raison des pertes d'énergie causées par les obstacles. Ce dispositif a ensuite été largement utilisé avec succès, comme en témoigne le nombre d'études qui s'y réfèrent [(Ciezki et Adomeit 1993; Hinkey, Bussing, et Kaye 1995a; Knystautas, Lee, et Guirao 1982; Hinkey, Bussing, et Kaye 1995b)...]. Il est particulièrement efficace pour les mélanges de carburant/oxygène ou carburant/air peu sensibles. Dans un tube lisse, la longueur de pré-détonation (L_{TDD}) est généralement plusieurs dizaines de fois le diamètre intérieur ($L_{TDD} \gg 40 - 50 \times d_{int}$) mais en présence de la spirale, cette distance est réduite à environ une dizaine de fois le diamètre intérieur ($L_{TDD} \gg 10 - 20 \times d_{int}$) (Shchelkin, 1940).

La Figure II-12 présente un schéma (a) et une photographie (b) d'une spirale de Shchelkin.

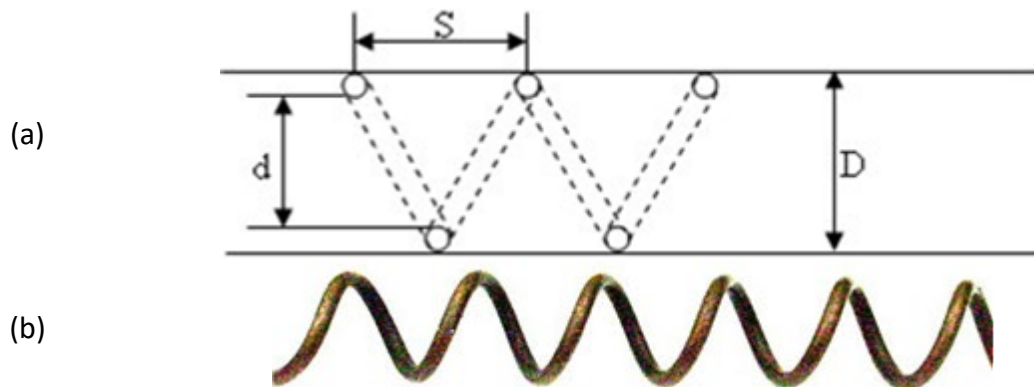


Figure II-12 : Schéma (a) et photographie (b) d'une spirale de Shchelkin

Une spirale en cuivre, connue sous le nom de « spirale de Shchelkin », représentée sur la Figure II-12b, est insérée dans la section moteur. Ses caractéristiques sont détaillées dans le tableau II-1.

Tableau II-1 : Caractéristiques géométriques (dimensions, rapport de blocage RB) de spirale de Shchelkin

D (mm)	d (mm)	S (mm)	$RB=1- (d/D)^2$
115	26	115	0.7

La spirale de Shchelkin a un rapport de blocage (RB) de 0,7 et un pas (S) égal au diamètre interne du tube.

Une bougie d'allumage est placée pour initier la flamme.

La taille des cellules de détonation peut être mesurée dans les deux configurations de tube à l'aide d'une feuille de suie.

2.3 Préparation des mélanges réactifs

La préparation des mélanges réactifs dépend de la nature des gaz utilisés. Deux méthodes ont été utilisées : soit la méthode de la pression partielle de chaque composant (décrite ci-dessous), soit en utilisant des débitmètres massiques pour obtenir instantanément des mélanges homogènes. C'est cette dernière méthode qui est détaillée ci-dessous.

2.3.1 Calibrage des débitmètres massiques

Le système de préparation de mélange avec les débitmètres massiques est composé de trois débitmètres massiques MKS, type 1179A et d'un contrôleur MKS type 247D, à quatre voies (Figure II-13). Les débitmètres sont calibrés avec du diazote pour des débits maximaux respectivement de 500, 2000 et 20000 sccm (pour *standard* cm³.min⁻¹ soit en cm³.min⁻¹ dans les conditions normales de T et P). Le régulateur de débit 1179A mesure le débit massique du gaz et le stabilise en fonction de la consigne donnée par le contrôleur MKS type 247D. Le débit massique est contrôlé, pour des températures comprises entre 0° à 50°C et avec une précision de ± 1% de la pleine échelle entre 2 à 100% de l'échelle.

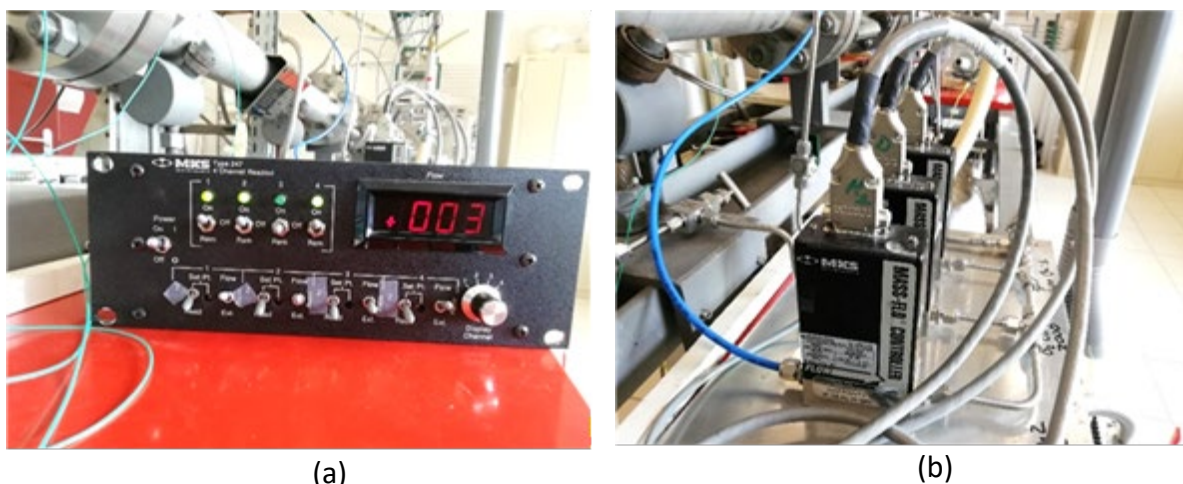


Figure II-13 : Photographie du Contrôleur (a) et du débitmètre massique (b)

Dans cette étude, les constituants des mélanges sont le propène, le dioxygène et le diazote. Les trois composés sont à l'état gazeux à la température ambiante et à la pression atmosphérique et ils sont donc utilisés, sans risque de condensation, pour la calibration des débitmètres massiques. Nous avons utilisé le débitmètre massique de débit maximum égal à 500 sccm pour le carburant (ici, le propène, C_3H_6), de débit maximum égal à 2000 sccm pour le dioxygène et de débit maximum égal à 20000 sccm pour le diazote (diluant). La calibration des débitmètres a montré qu'il faut attendre trois minutes pour obtenir la stabilisation de la valeur des débits fixés à l'aide du contrôleur. Par exemple pour un débitmètre donné, on fixe la valeur de la consigne (qui est représentative de la tension de contrôleur des débitmètres) et on fait entrer le gaz à étalonner dans un ballon à prélèvement « Pyrex ». Par la suite, le ballon en verre sera analysé par le micro-GC (cf. paragraphe suivant).

La Figure II-14 présente le résultat des étalonnages et les droites d'étalonnage obtenues pour les trois gaz (carburant, comburant, diluant). La valeur de la consigne est représentative de la tension de contrôleur des débitmètres.

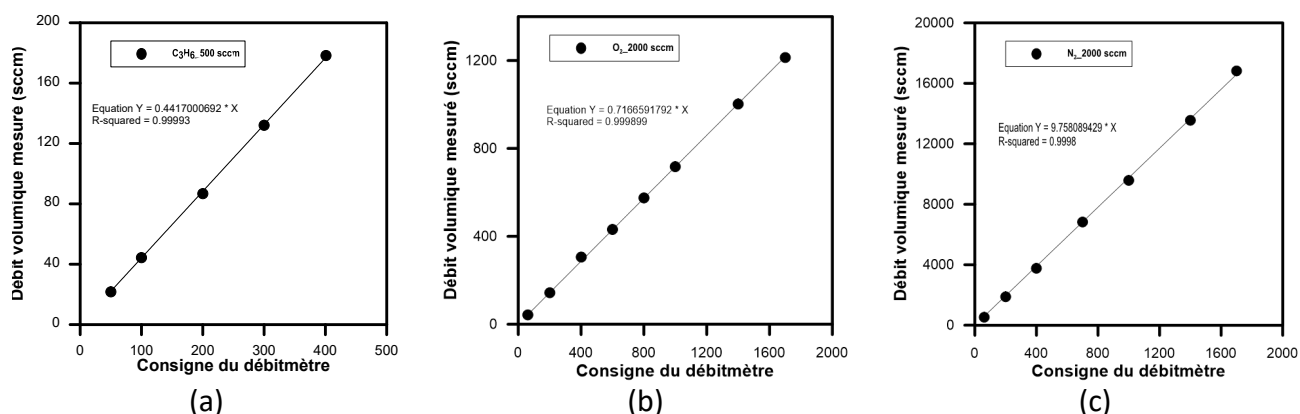


Figure II-14 : Droites de calibration des différents débitmètres massiques pour : a) le propène (C_3H_6), b) le dioxygène (O_2), et c) le diazote (N_2)

Comme on peut le voir sur la Figure II-14, nous avons obtenu des droites affine d'ordonnée à l'origine nulle, c'est-à-dire de la forme $y = a x$ (avec a la pente) pour lesquelles le coefficient de corrélation R^2 est supérieur à 99,98%, donc très proche de 1. Les équations des droites, les coefficients de corrélation et l'incertitude sont rassemblées dans le tableau II-2.

Tableau II-2 : Débits maxima, équations des droites d'étalonnage, coefficients de corrélation et incertitudes pour chaque espèce gazeuse étudiée (propène C_3H_6 , dioxygène O_2 et diazote N_2).

	Débit max (sccm)	Equation du débitmètre	R^2	Incertitude (sccm)
C_3H_6	500	$=0,4417 \cdot \text{Consigne}$	0,9999	± 5
O_2	2000	$=0,7167 \cdot \text{Consigne}$	0,9998	± 20
N_2	20000	$=9,7581 \cdot \text{Consigne}$	0,9998	± 200

D'après le manuel du régulateur et des débitmètres, les facteurs de correction pour le propène, le dioxygène et le diazote, sont respectivement de 0,41 ; 0,993 et 1. Nous avons redéterminés ces facteurs de correction pour confirmer ou corriger les facteurs fournis par le constructeur (Tableau II-4).

Tableau II-3 : Calibration de N_2 pour tous les 3 débitmètres

	Débit max (sccm)	Equation du débitmètre	R^2	Incertitude
N_2	500	$=1,0877 \cdot \text{Consigne}$	0,9998	± 5
N_2	2000	$= 0,733 \cdot \text{Consigne}$	0,9999	± 20
N_2	20000	$=9,7581 \cdot \text{Consigne}$	0,9997	± 200

Le facteur de correction de gaz (GCF : Gas Correction Factor) est calculé à partir du rapport de coefficient directeur d'un gaz sur celui du diazote, comme illustré dans le tableau II-4.

Tableau II-4 : Comparaison de facteur de correction des gaz (GCF)

	Débit max	GCF déterminé au labo	GCF Paramètres d'usine	Erreur %
C_3H_6/N_2	500	0,406	0,410	0,95%
O_2/N_2	2000	0,978	0,993	1,53%
N_2/N_2	20000	1,000	1,000	0,00%

Comme indiqué dans le Tableau II-4, les GCF calculés pour le propène, le dioxygène et le diazote sont respectivement 0,406 ; 0,978 et 1 avec une erreur de 1,53% au maximum. Après la comparaison du facteur de correction de gaz calculé avec celui du fabricant des débitmètres massiques, il est à présent possible d'estimer la composition du mélange à étudier. Ensuite, cette composition sera analysée à l'aide d'un micro-GC afin de vérifier la composition exacte.

2.3.2 Analyses chromatographiques

La chromatographie en phase gazeuse est une méthode de séparation des constituants d'un mélange gazeux. Le principe de fonctionnement d'un chromatographe repose sur l'identification et la quantification des espèces chimiques transportées par une phase mobile (gaz vecteur) et séparées selon leur affinité par une phase stationnaire (colonne chromatographique). Par conséquent, chaque composé est caractérisé par un temps de rétention qui correspond au temps nécessaire pour sortir de la colonne. L'enregistrement, à la sortie de la colonne, du signal produit, en fonction du temps, par le détecteur fournit un chromatogramme qui permet l'identification des composés et leurs quantifications. De ce fait, un chromatographe est constitué des trois éléments principaux : un injecteur, une colonne et un détecteur. Dans le cadre de cette étude, nous utilisons un chromatographe en phase gazeuse de type micro-GC (SRA Instruments, modèle A et C) constitué de trois modules analytiques indépendants (A, B ou C) dont les caractéristiques sont décrites dans le tableau 5. Les trois modules analytiques sont équipés du même type d'injecteur et du même type de détecteur mais ont des colonnes chromatographiques différentes. Le détecteur est de type TCD (Thermal Conductivity Detector) et repose sur la mesure de la variation de conductibilité

thermique des mélanges gazeux en fonction de leur composition. Chaque analyte élué induit une réponse du TCD qui se traduit par l'apparition d'un pic sur le chromatogramme. L'aire de ce pic est représentative de la quantité de l'analyte.

Tableau II-5 : Types de modules disponibles (colonnes/gaz vecteurs) du micro-GC en fonction des espèces analysées

Modules	A	B	C
Gaz vecteurs utilisés	Argon	Hélium	Hélium
Colonnes utilisées	Molsieve (Tamis moléculaire)	Molsieve (Tamis moléculaire)	PoraPLOT Q (PPQ)
Espèces analysées	H ₂ , O ₂ , N ₂	CH ₄ , CO	COS, H ₂ S, CO ₂ , C ₂ à C ₃

Pour la présente étude, nous avons utilisés le module A pour l'analyse O₂/N₂ et le module C pour C₃H₆/C₃H₈/C₃H₇NO₃.

Pour réaliser l'étalonnage à partir des chromatogrammes, nous avons utilisé des mélanges étalons que nous avons préparés par la méthode des pressions partielles. L'analyse par la micro-GC de ces mélanges a permis de tracer la droite d'étalonnage représentant la composition des différents composés en fonction de l'aire mesurée sur le chromatogramme (Figure II-15).

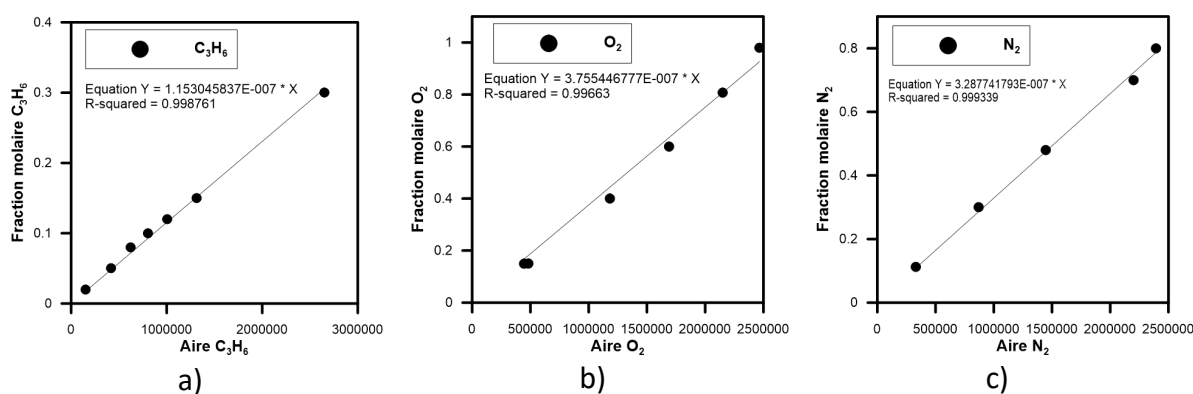


Figure II-15 : Courbe de calibration du micro-GC pour les différents composés étudiés : a) propène, b) dioxygène et c) diazote)

Afin d'illustrer la méthode utilisée, un exemple de chromatogramme obtenu pour l'analyse d'un étalon composé de 12%C₃H₆ + 40,79%O₂ + 47,21%N₂ est donné sur la Figure II-16.

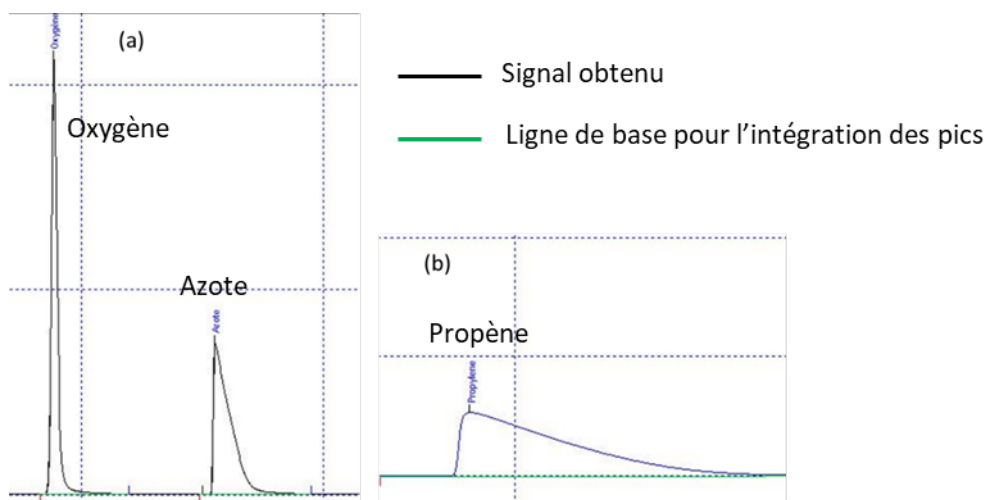


Figure II-16 : Exemple d'un chromatographe type : a) Module A : O_2 et N_2 ; b) Module C : C_3H_6

La Figure II-16 est un exemple d'un chromatographe d'un mélange $C_3H_6/O_2/N_2$. La ligne noire est le signal obtenu et la ligne verte est la base de l'intégration des pics. Pour chaque pic d'intégration correspond à une fraction molaire des étalons.

2.4 Conditions expérimentales

Les expériences sont réalisées avec des mélanges stœchiométriques de propane/dioxygène (C_3H_8/O_2) et de propène/dioxygène (C_3H_6/O_2) dilués dans le diazote pour obtenir un rapport entre les teneurs (exprimées en termes de fractions molaires) en diazote et en dioxygène (X_{N_2}/X_{O_2}) compris entre 0 et 2. Les mélanges $C_3H_8/O_2/N_2$ et $C_3H_6/O_2/N_2$ sont introduits en même temps dans le tube en utilisant les débitmètres massiques. Les mélanges $C_3H_8/O_2/N_2$ et $C_3H_6/O_2/N_2$ contenant 10% de l'IsoPropyle de Nitrate (IPN) sont préparés, en utilisant la méthode des pressions partielles, dans des réservoirs équipés d'un agitateur afin d'homogénéiser le mélange avant son introduction dans le tube.

La pureté des réactifs utilisés comme constituants du mélange réactionnel pour cette étude est la suivante :

- Le propane (Propane N25, Air-liquide) : pureté supérieure à 99,5% ;
- L'isoPropyle de Nitrate (IPN, Sigma Aldrich et Matrix fine Chemicals company) : pureté inférieure à 98% ;
- Le propène (Propyène N25, Air-liquide) : pureté supérieure à 99,5% ;
- Le dioxygène (alpagaz 1 O_2 , Air liquide) : pureté supérieure à 99,995 % ;
- Le diazote (alpagaz 2 N_2 , Air liquide) : pureté supérieure à 99,9999 %.

L'étude de la transition onde de choc-détonation et de la transition déflagration-détonation dans ces mélanges est réalisée pour une température initiale des mélanges réactifs (T_1) proche de 293 K et pour deux pressions initiales (P_1) égales à 6,7 kPa et 13,3 kPa.

Dans le cas de la transition onde de choc-détonation, la pression P_4 du gaz dans la section moteur a été variée entre 200 à 1900 kPa pour déterminer la force de choc nécessaire pour l'initiation d'une détonation auto-entretenue. Dans le cas de la transition d'une déflagration à la détonation initiée par une étincelle, on fait varier les rapports (X_{N_2}/X_{O_2}) pour les deux pressions initiales (6,7 et 13,3 kPa).

2.4 Méthodologie

2.4.1 Détermination de la célérité de l'onde de choc incidente

La vitesse de l'onde est mesurée par les détecteurs de chocs piézoélectriques (SD pour Shock Detector) à l'intérieur du tube. Le passage de l'onde de choc au niveau de chacun des détecteurs de chocs SD est marquée par une montée très rapide du signal de tension sur l'oscilloscope. La très faible surface sensible des détecteurs SD ($0,75 \text{ mm}^2$) permet de réduire l'incertitude associée aux mesures de vitesse d'onde (temps de montée de $0,4 \mu\text{s}$). Cependant, ils sont très sensibles au transfert de chaleur et ne peuvent donc pas être utilisés pour mesurer la pression derrière les ondes. Les profils de pression sont donc plutôt enregistrés à l'aide des capteurs de pression piézo-électriques PCB. La Figure II-18 illustre un exemple d'enregistrement des profils de pression mesurés par les capteurs piézoélectriques PBC10 à PCB13 sur l'oscilloscope à mémoire 4 voies (Rohde & Schwarz RTB2004 ; $2,5 \text{ GSa.s}^{-1}$). Pour chaque capteur, le pic de pression détecté correspond également au passage de l'onde de choc incidente.

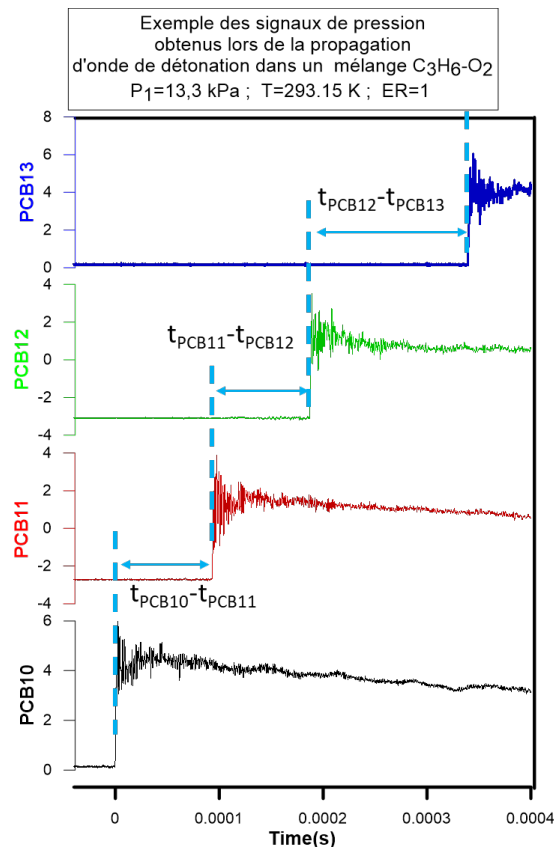


Figure II-17 : Exemple de signaux émis par les capteurs de pression lors du passage d'une onde de détonation dans un mélange $C_3H_8-O_2$.

Dans la Figure II-17, l'instant d'arrivée de l'onde de choc ou de l'onde de détonation est déterminé à partir de la montée instantanée des signaux électriques enregistrés par les capteurs. Les positions des capteurs le long de la section basse pression sont indiqués dans le tableau II-6. A partir de cela, on peut déterminer la vitesse de l'onde.

Tableau II- 6 : Positions des capteurs Chimie métal (SD : Détecteur de Choc ou Shock detector) et piézo-électrique (PCB) le long de la section basse pression. L'origine est prise sur le premier capteur SD1

Capteurs	SD1	SD2	SD3	SD4	SD5	SD6	SD7	SD8
Position (mm)	0	214,99	430,06	645,19	993,87	1208,09	1422,79	1637,12
Capteurs	PCB9	PCB10	PCB11	PCB12	PCB13	PCB14/S D14	SD15	SD16
Position (mm)	1987,4 8	2201,81	2416,04	2630,6	2980,88	3329,48	3479,26	3627,42
Capteurs	PCB17/ SD17	SD18	PCB19/S D19	SD20				
Position (mm)	3777,6 9	4103,37	4203,57	4300,08				

A partir des positions des capteurs indiqué dans le tableau II-6, un ajustement polynomial est utilisé pour décrire la trajectoire (x_{SDi} ou $x_{PCBi} = f(t_{SDi}$ ou t_{PCBi})) [avec $x=$ la

distance du capteur et t =le temps de passage de l'onde de choc]. La vitesse des ondes (de choc ou de détonation) est ensuite déduite de l'équation de la trajectoire en la dérivant par rapport au temps ($Vitesse=dx/dt$), pour chaque position du capteur.

La capacité d'un mélange explosif à détoner, après le passage d'une onde de choc incidente, est généralement caractérisée par trois phénomènes différents (Chaumeix, et al. 2014):

1. L'onde de choc, générée par la dépressurisation à l'hélium, se propage à travers la section de travail sans déclencher la réaction explosive.
2. L'onde de choc s'accélère soudainement dans la zone de mesure. Sa vitesse peut être supérieure à la vitesse de Chapman-Jouguet, D_{CJ} . La variation brutale de la vitesse de l'onde de choc V_{OC} révèle la transition-choc-détonation (TCD).
3. Le front d'onde se propage à travers la zone de mesure à une vitesse constante proche de la vitesse de Chapman-Jouguet, D_{CJ} .

Lorsque la TCD se produit à l'intérieur de la zone de mesure, il est possible que tous les capteurs détectent le passage de l'onde de choc précurseur, de l'onde de combustion et de la détonation saturée comme montré sur la Figure 18.

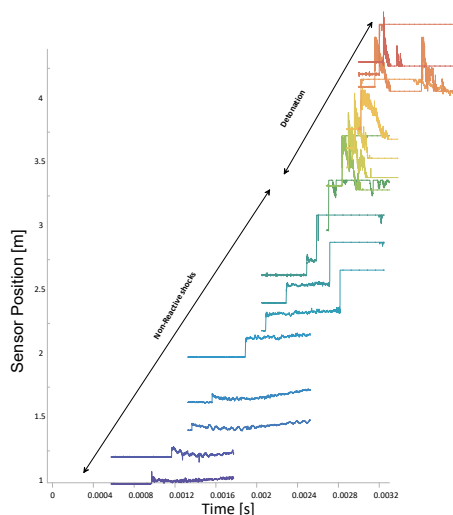


Figure II-18 : Exemple des signaux produits par les capteurs de pression avec des chocs non réactifs jusqu'à 3 m suivis d'un passage à une onde de détonation dans un mélange $C_3H_8-O_2$ initialement à 13,3 kPa.

La propagation d'une onde de combustion peut se produire à des vitesses subsoniques, appelées déflagration ou couplée à une onde de choc à des vitesses supersoniques, appelées détonation. Les aspects théoriques portant sur la différence de vitesse entre une onde de déflagration et une onde de détonation et plusieurs autres paramètres fondamentaux sont

détaillés dans les chapitres 1 et 4. Les vitesses théoriques et les propriétés de détonation des mélanges étudiés sont calculées par COSILAB (v.4.3.2. 2009). (voir paragraphe 1 du chapitre 4). Les résultats sont présentés dans le chapitre 4.

2.4.2 Détermination de la taille de cellule par la méthode des traces de suie

Au cours de l'étude de la TCD et de la TDD, nous avons utilisé une seule méthode pour déterminer la taille de cellule : la méthode des traces sur suie. Cette méthode permet de calculer la taille de la cellule de détonation tout au long de la propagation de la détonation dans le tube.

Ce procédé a été adopté pour l'étude des détonations depuis que (Denisov et Troshin 1961) ont démontré que la détonation présente une structure tridimensionnelle périodique avec une largeur caractéristique λ . Leur observation a révélé que la détonation laisse une empreinte de son passage sur une couche de carbone préalablement déposée sur une surface. Cette découverte a ouvert la voie à l'utilisation de ce procédé pour approfondir notre compréhension des caractéristiques et des mécanismes fondamentaux des détonations.

On peut observer la structure tridimensionnelle de l'onde de détonation en utilisant une méthode de visualisation. Pour ce faire, une feuille de polyester transparente d'une épaisseur de 500 μm est placée sur une partie du tube. Cette feuille est préalablement enduite de suie et appliquée sur la surface interne du tube. Lorsque l'onde de détonation se propage à travers le mélange explosif, les points de collision des ondes, connus sous le nom de points triples, laissent leur empreinte sur les parois noircies du tube. Ces empreintes forment des trajectoires en forme de losanges, appelées cellules de détonation (voir Figure II-19).

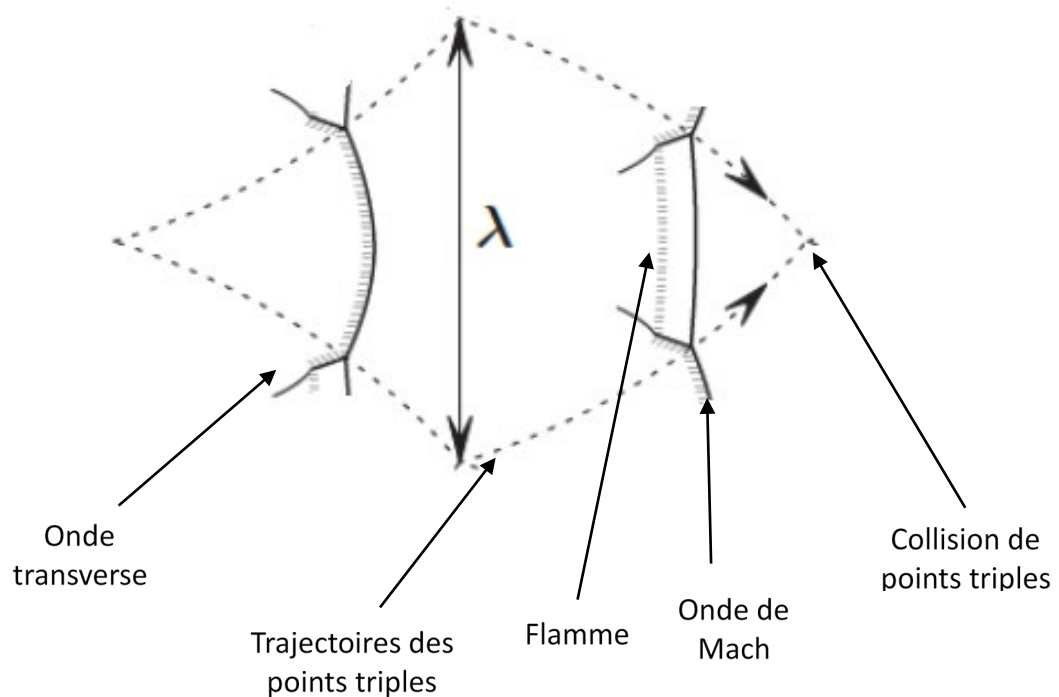


Figure II-19 : Représentation bidimensionnelle de la structure cellulaire d'un front de détonation (LijuanLiu et Zhang 2019)

Dans la Figure 19, le front de la détonation est constitué d'un ensemble d'ondes de choc se propageant longitudinalement (onde incidente et onde de Mach) et transversalement (ondes réfléchies), formant ainsi des points triples. La largeur (λ) de ce front dépend de la composition du mélange (nature, rapport d'équivalence, dilution) ainsi que des paramètres de son état initial (pression, température). Elle permet également de caractériser la sensibilité d'un mélange réactif. Une faible dimension de la taille de la cellule λ se traduit par une plus grande sensibilité à la détonabilité du mélange.

Lorsque l'onde de détonation se propage au niveau d'une feuille de suie, les trajectoires des points triples sont enregistrées sous la forme de traces qui révèlent une structure en nid d'abeille ou en écaille de poisson. La Figure II-20 présente un exemple d'une feuille de suie affectée par une onde de détonation.



Figure II-20 : Exemple d'un enregistrement sur feuille de suie de la structure cellulaire d'une détonation se propageant dans un mélange $C_3H_8/IPN/O_2$. Conditions initiales : $ER=1$; $P_1=6,7kPa$; $T_1=294 K$.

Les feuilles de suie, comme cellules présentées sur la Figure II-20, sont ensuite scannées et numérisées et la largeur des cellules de détonation est mesurée à l'aide du logiciel ImageJ (Image J 1.53 c). Les largeurs de cellules présentées dans ce manuscrit correspondent à la valeur moyenne entre la plus petite et la plus grande largeur de cellule mesurée sur une feuille de suie individuelle.

3 Outils de calcul

Le logiciel COSILAB (COSILAB v4.3.2. 2009) est un logiciel commercial, développé par le laboratoire de Haan en Allemagne, est un ensemble d'outils de simulation et de modélisation des phénomènes de combustion permettant le calcul d'un certain nombre de paramètres physiques et chimiques tels que la température de flamme adiabatique, les paramètres « Chapman-Jouget » de détonation ou la vitesse fondamentale d'une flamme de pré-mélange.

La Figure II-21 présente l'architecture des programmes dans le logiciel COSILAB (COSILAB 2009).

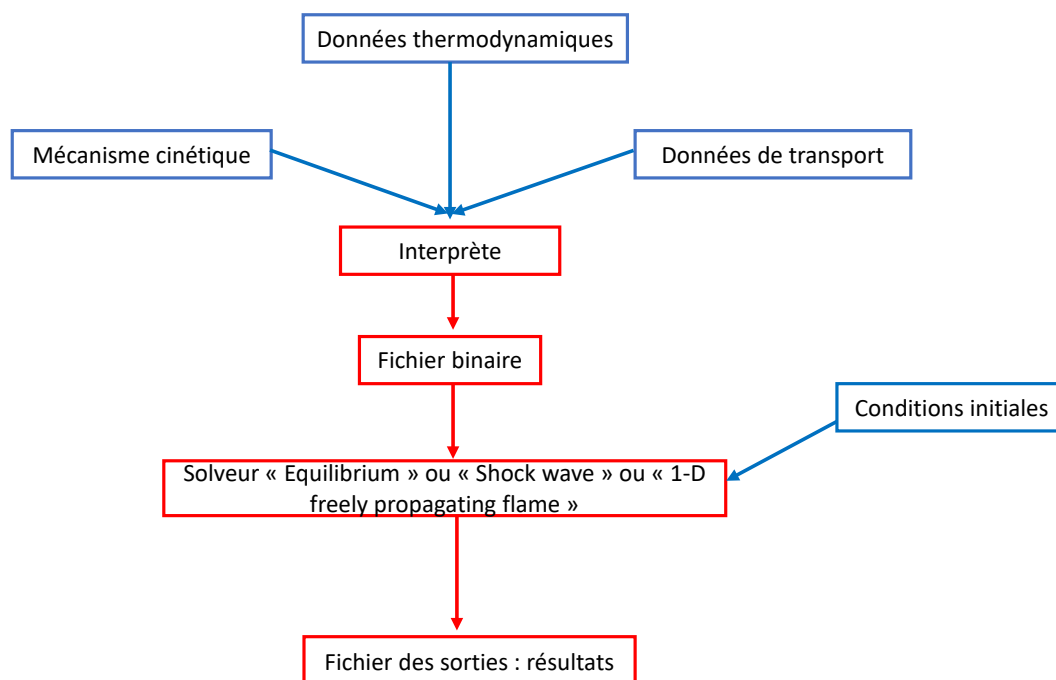


Figure II- 21 : Architecture de fonctionnement des codes de calculs du COSILAB

Tout d'abord, le logiciel examine trois fichiers d'entrée fournis par l'utilisateur afin de vérifier leur intégralité et leur conformité syntaxique. Ces trois fichiers regroupent :

- Le fichier « Données thermodynamiques » rassemblant les données de toutes les espèces déclarées dans le fichier "Mécanisme cinétique" sous forme polynomiale, selon le formalisme du « NASA Chemical Equilibrium Program » (Gordon et Mac Bride 1971). Ces données sont compilées sous forme de deux ensembles de sept coefficients, correspondant à deux plages de température : $1000 \leq T \text{ (K)} \leq 500$ et $300 \leq T \text{ (K)} \leq 1000$.
- Le fichier "Données de transport" contient les paramètres moléculaires des espèces déclarées, tels que leur géométrie (atome simple, molécule linéaire ou molécule non linéaire), le potentiel de Lennard-Jones et le moment dipolaire.
- Le fichier "Mécanisme cinétique" contenant l'ensemble des réactions élémentaires impliquant toutes les espèces préalablement déclarées. Pour chaque réaction, le fichier inclut les paramètres cinétiques (A , β , E_a) associés sous la forme de l'équation d'Arrhénius ($k=A.T^\beta.\exp(-E_a/RT)$), où A représente le facteur pré-exponentiel, β est le terme de dépendance en température et E_a est l'énergie d'activation.

Une fois la vérification effectuée, l'interpréteur de COSILAB procède à la compilation des trois fichiers en un fichier binaire qui peut être utilisé par les divers solveurs du logiciel. En plus de ce fichier binaire, les solveurs appellent un fichier contenant les "conditions initiales" dans lequel les données d'entrée sont spécifiées par l'utilisateur pour résoudre le système d'équations différentielles représentant l'évolution du système réactif. Les conditions initiales

incluent *a minima* la composition du mélange à étudier et les conditions thermodynamiques (température, pression ainsi que le type de réacteur à prendre en compte (par exemple, calcul à pression constante ou modèle de Chapman-Jouguet). Dans certains cas, d'autres paramètres sont requis comme les vitesses de choc incidentes, par exemple. Une fois les équations résolues, un "fichier résultat" est généré, répertoriant les solutions obtenues.

Le logiciel COSILAB (COSILAB 2009) est un ensemble de modules qui permet de réaliser des simulations des phénomènes de combustion, allant de simulations 0D à des simulations plus complexes. Dans le cadre de ce projet de thèse, les simulations ont été effectuées en utilisant à la fois des modèles 0D et 1D, avec différents packages (détails disponibles dans le paragraphe 2.4.c).

Dans l'étude du comportement de la vitesse de flamme, le package « Equilibrium Calculations » a été utilisé dans le but de déterminer la pression et la température à l'équilibre. La pression à l'équilibre, P_{AICC} (Pression Adiabatique Ischorique à Combustion Complète) est obtenue en supposant une combustion complète, isochore (à volume constant) et adiabatique (sans échange de chaleur avec l'extérieur). La pression maximale, P_{AICC} , est ensuite comparée à la pression expérimentale du pic de la combustion. S'agissant de la température adiabatique, T_f , elle est déterminée pour des conditions adiabatique et isobare (à pression constante). Dans le cas des calculs thermodynamiques, seuls les fichiers incluant les données thermodynamiques et les conditions initiales sont requis.

Nous avons également utilisé, le package « 1-D freely propagating flame » pour calculer la vitesse de flamme laminaire et comparer les résultats de la simulation avec les mesures expérimentales. Dans le cas des calculs de vitesse de flammes, les fichiers incluant les données thermodynamiques, de transport, cinétiques et les conditions initiales sont requis.

Bilan

Dans ce chapitre les dispositifs expérimentaux et les outils numériques utilisés dans le cadre de cette thèse ont été présentés. Ces dispositifs et les méthodologies associées ont joué un rôle essentiel dans la collecte de données précieuses et la compréhension approfondie des phénomènes étudiés tout au long de cette thèse. Les résultats expérimentaux et la modélisation des paramètres fondamentaux de la combustion des mélanges étudiés sont présentés en détail dans le chapitre 3.

Chapitre III – Propagation des flammes laminaires

Ce chapitre a pour but de présenter les résultats de mesures de vitesses de flammes des composés réalisés grâce au dispositif expérimental précédemment décrit. Ces mesures ont tout d'abord été effectuées à température ambiante (300 K). En effet, c'est à la température ambiante que les données de la littérature sont les plus abondantes pour les valider. Cette validation est nécessaire avant de pouvoir envisager une montée en température puis en pression par la suite.

Les vitesses des flammes laminaires de mélanges propane/air et propène/air à la température ambiante ont déjà été étudiées, en particulier à l'aide des trois dispositifs principaux décrits dans le chapitre, à savoir la bombe sphérique, le brûleur à contre-courant et le brûleur adiabatique à flamme plate. Les principales données issues de la littérature concernant les vitesses de flammes du propane/air et les dispositifs utilisés sont regroupés dans le chapitre I sous forme d'un tableau (Tableau I-3).

Les résultats présentés dans ce chapitre porteront sur : (i) la mesure de la vitesse de flamme laminaire ; (ii) la mesure de la longueur de Markstein en fonction de la richesse du mélange ; (iii) la modélisation de l'épaisseur de flamme, l'énergie d'activation, le nombre de Zeldovich et le nombre de Lewis ; (iv) l'effet des instabilités sur la flamme pour les mélanges : propane/air, iso-propyl-nitrate/air, propane- iso-propyl-nitrate /air et propène/air. La vitesse de combustion laminaire est directement liée aux propriétés du mélange réactif considéré (en termes de composition et de rapport d'équivalence) et aux conditions thermodynamiques du fluide dans lequel la flamme se propage. L'influence de chacun des quatre paramètres, rapport d'équivalence, pression, température et l'effet de l'additif est étudiée ici.

1 Etude des mélanges Propane / Air

Comme introduit dans ce manuscrit, les vitesses de flamme laminaire S_L^0 de mélange propane/air ont été déterminées expérimentalement en bombe sphérique. Les mesures des vitesses de flamme ont été réalisées à deux températures : 300 K et 373 K pour une pression de 100 kPa. Le domaine de rapport d'équivalence est compris entre 0,7 et 1,7. En dehors de cet intervalle, les instabilités thermo-diffusives dominant, ce qui empêche toute extraction de la vitesse de flamme laminaire ainsi que d'autres paramètres fondamentaux. La détermination du S_L^0 permet ensuite la détermination d'autres paramètres fondamentaux de la combustion

tels que l'énergie d'activation (E_a), le nombre de Zeldovich (β) et l'épaisseur de flamme (δ). Durant ces travaux, le nombre de Lewis effectif (Le_{eff}) a également été calculé pour le mélange. Ce calcul s'effectue uniquement par simulation. La détermination de ces différents paramètres n'a pas pour but de développer un nouveau mécanisme cinétique ou encore d'améliorer des mécanismes existants. Elle permet pour les conditions de la présente étude, de sélectionner le mécanisme le plus approprié dans le but de réaliser une analyse de carburants compatibles avec des moteurs à détonations pulsés.

La détermination de ces paramètres est basée sur l'évolution temporelle du rayon de front de flamme R_f , la flamme étant visualisée par un montage Schlieren, en utilisant la méthodologie non-linéaire décrite dans le chapitre 2.

1.1 Evolution du rayon en fonction du temps

L'étude des flammes laminaires implique le suivi du front de flamme. Comme décrit précédemment, la fréquence d'acquisition de la caméra rapide ainsi que le diamètre de la fenêtre de visualisation sont utilisées pour définir les échelles temporelle et spatiale. Cela permet d'obtenir le rayon de la flamme en fonction du temps.

Comme décrit dans le chapitre 2, les images Schlieren de la flamme en expansion ont été traitées à l'aide d'un code Matlab développé au laboratoire pour obtenir le rayon. Le nombre de points pour décrire l'évolution d'un rayon de flamme mesuré par expérience, en fonction du temps, dépend de la vitesse de propagation de la flamme : pour les flammes les plus rapides, ce nombre est d'environ 160, pour les flammes les plus lentes, il est généralement d'environ 400 (Figure III- 1). Lors de la réalisation des expériences, il est impératif de vérifier la forme de la flamme pendant sa propagation pour s'assurer qu'aucune déformation ne s'est produite. Ces déformations sont souvent dû à un désalignement des électrodes et/ou au début de l'effet de flottabilité. Ainsi, pour chaque image traitée, un rapport est calculé pour évaluer la forme du contour de flamme détecté par rapport à une sphère idéale. Ce rapport est appelé la sphéricité et est définie comme le rapport entre le plus petit rayon et le plus grand rayon du contour de la flamme pour chaque cadre individuel. Lorsque, le contour de la flamme correspond à une sphère parfaite, ce rapport est égal à 1.

Au dispositif de visualisation et de capture des images, se rajoute l'effet de la taille de l'enceinte (ainsi que sa forme) qui se traduit par la vérification de l'hypothèse selon laquelle l'enregistrement de la flamme ne se fait que durant la période où la pression initiale est constante. La Figure III- 1 présente l'évolution temporelle du rayon de la flamme et la pression d'un mélange stœchiométrique du propane/air à 300 K et 100 kPa.

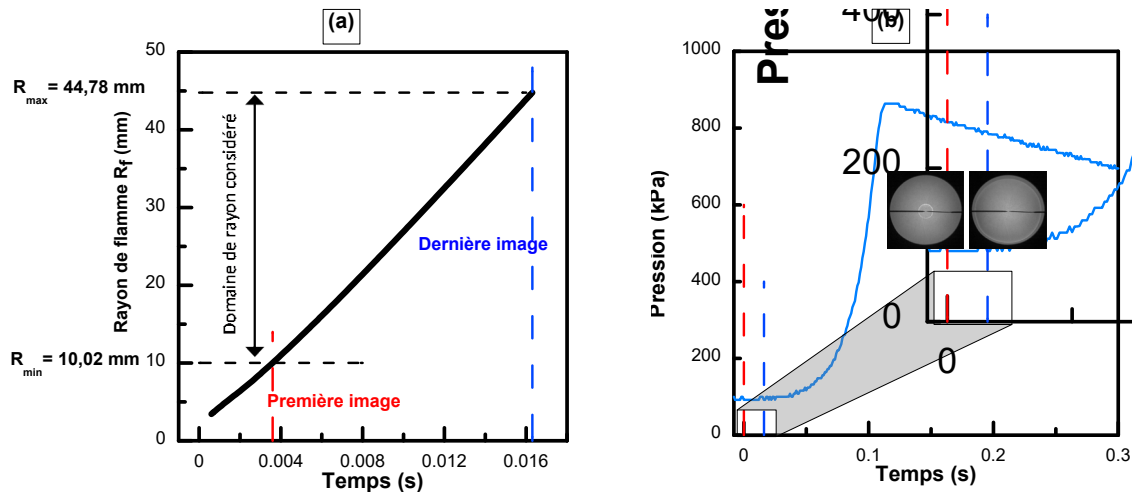


Figure III- 1 (a) Rayon de la flamme en fonction du temps ; (b) Evolution de la pression pour le mélange stœchiométrique de C_3H_8 /air à $T_0=300$ K et 100 kPa.

Comme on peut le voir sur la Figure III- 1a, le profil temporel du rayon de la flamme est linéaire. La plage de rayon expérimental utilisée dans ce traitement de données est comprise entre 10 à 45 mm. Le rayon minimum a été fixé pour éliminer l'effet de l'énergie d'allumage tandis que le rayon maximum a été choisi pour éviter l'effet de la pression sur la flamme laminaire [20]. Durant cet intervalle de temps d'observation, la pression reste constante (Figure III- 1b).

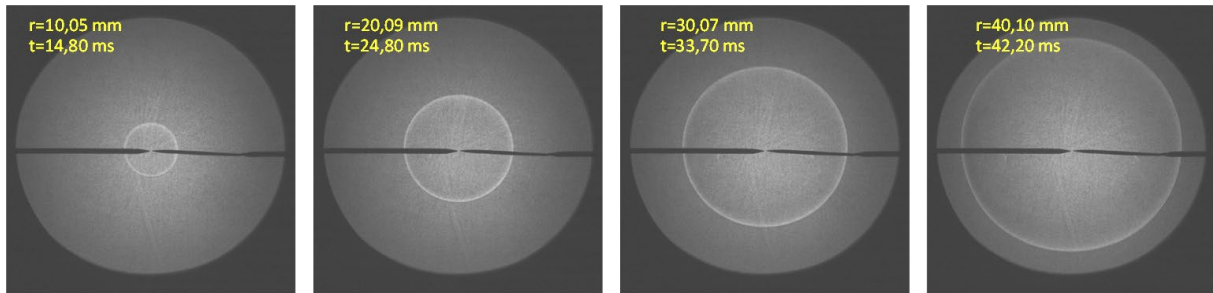
Notons que la détermination de la vitesse de flamme doit être effectuée sur la partie linéaire de l'évolution du rayon en fonction du temps.

1.2 Vitesse de flamme laminaire

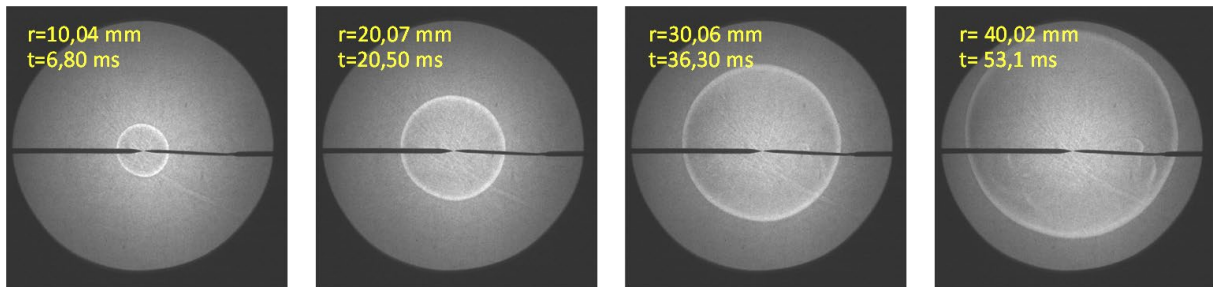
La bombe sphérique décrite dans le précédent chapitre a été utilisée pour étudier la vitesse de flamme d'un hydrocarbure présent dans les gaz naturels, le propane. Les mesures ont été réalisées pour deux températures 300 et 373 K, à une pression de 100 kPa et en utilisant de l'air synthétique (79,1% (vol.) N_2 et 20,9% O_2). Les expériences ont été effectuées pour une large gamme de rapport d'équivalence, allant de 0,7 à 1,7.

Pour chaque série d'expériences, les valeurs inférieure et supérieure du rapport d'équivalence ont été établies de manière à garantir que les flammes restent sphériques et lisses jusqu'à 97 mm (ce qui correspond à la limite du domaine de visualisation).

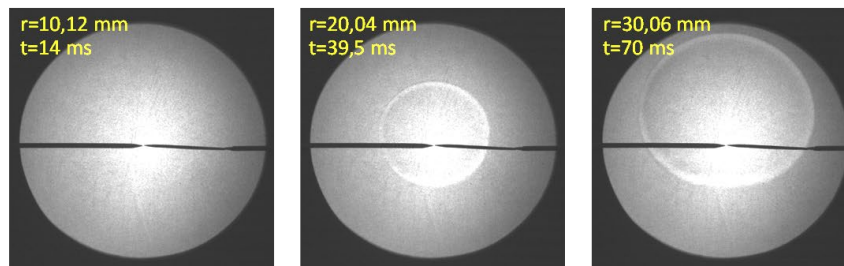
La Figure III- 2 représente les images des flammes instantanées propane/air à différents rayons pour différentes valeurs du rapport d'équivalence.



(a) Flamme sphérique lisse pour C_3H_8 /air à 300 K et 100 kPa, rapport d'équivalence (ER) = 0,7



(b) Flamme sphérique lisse pour C_3H_8 /air à 300 K et 100 kPa, rapport d'équivalence (ER) = 1,7



(c) Flamme ascendante avec flottabilité pour C_3H_8 /air à 300 K et 100 kPa, rapport d'équivalence (ER) = 1,9

Figure III- 2 : Images Instantanées des flammes propane/air à divers rayons pour différentes valeurs du rapport d'équivalence.

La Figure III- 2a illustre une flamme représentative d'un mélange pauvre. Le rapport d'équivalence minimum pour lequel il a été possible d'allumer a été déterminé en fonction de l'énergie d'allumage disponible. Du côté riche en carburant, le rapport d'équivalence maximal pour lequel des flammes exploitables était limité par l'émergence soit (i) du plissement de la surface de la flamme (Figure III- 2b), soit (ii) de l'effet de flottabilité conduisant à une propagation ascendante de la flamme (Figure III- 2c).

En raison de la contrainte de diamètre du domaine de visualisation à 97 mm, alors que le diamètre interne de l'installation est de 473 mm (chapitre 2), le changement de pression au cours de la période de mesure est effectivement nul, comme illustré sur la Figure III-1b.

La vitesse de flamme à étirement nul est calculée à l'aide d'une équation non linéaire, comme décrit dans le chapitre 1 équation Eq. I-31 (Nativel et al. 2016c). Pour chaque flamme, le rayon minimum est fixé pour éviter l'effet de l'énergie d'allumage, généralement choisi pour être supérieur ou égal à 10 mm dans cette étude. Le rayon maximum est sélectionné pour garantir une flamme lisse. Un exemple d'extraction de vitesse de flamme non étirée est donné sur la Figure III- 3.

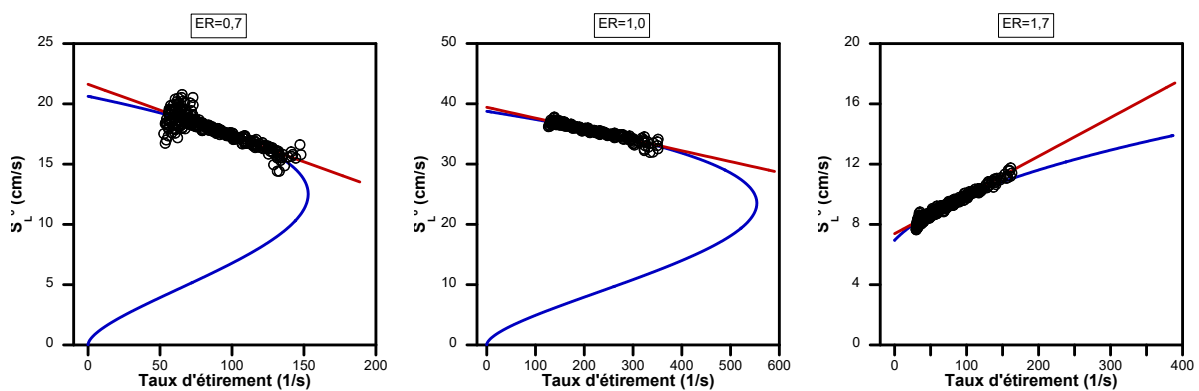


Figure III- 3 : Evolution de la vitesse de flamme laminaire en fonction du taux d'étirement pour trois rapports d'équivalence (0,7 ; 1 et 1,7) du mélange C_3H_8 /air à 300 K et 100 kPa. La ligne rouge correspond à la régression linéaire des données, la courbe bleue représente l'ajustement non linéaire (Eq. I-31 chapitres 1) et les points noirs sont les données expérimentales.

Comme on peut le voir sur la Figure III- 3, les données expérimentales suivent l'allure de la régression non linéaire. Pour le mélange pauvre en carburant et la condition stœchiométrique, la vitesse de flamme décroît en fonction du taux d'étirement alors que pour le mélange riche, elle augmente.

Les quatre méthodes d'extrapolation décrit au chapitre 2, à savoir le modèle linéaire basé sur l'étirement (LS), le modèle linéaire basé sur la courbure (LC), le modèle non linéaire à 3 paramètres (N3P), le modèle non linéaire sous forme de développement en série limitée (NE) et le modèle non linéaire quasi-stationnaire (NQ) ont été utilisés pour vérifier que les résultats ne sont pas impactés par le choix de la méthode. Les résultats obtenus avec ces modèles sont présentés sur la Figure III- 4. sur laquelle l'évolution du paramètre $\{Ma_{linear} \cdot Ka_{middle}\}$ en fonction du rapport d'équivalence est aussi représentée.

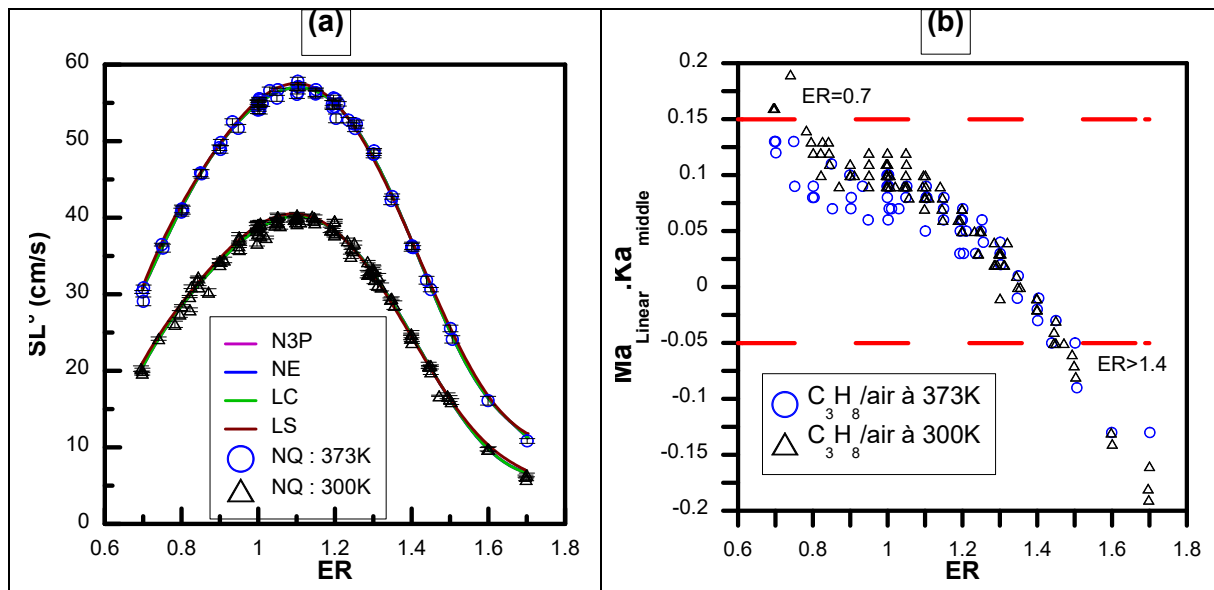


Figure III- 4 : (a) Modèles d'extrapolation sur S_L^0 et (b) le paramètre $Ma_{linear}.Ka_{middle}$ en fonction du rapport d'équivalence pour le mélange C_3H_8/air , $T_{ini}=300$ et 373 K, $P_{ini}=100$ kPa

Comme on peut le constater sur la Figure III- 4a, il y a un accord parfait entre les modèles d'extrapolation, ce qui montre que les flammes obtenues dans la bombe sphérique actuelle sont suffisamment grandes pour que le taux d'étirement puisse être considéré comme faible (Chen 2011a). Cela est également vérifié via le calcul du paramètre $\{Ma_{linear}.Ka_{middle}\}$, le nombre de Markstein est obtenu en utilisant le modèle LS et le nombre de Karlovitz est calculé au rayon moyen pour chaque expérience. Selon Wu et al. (Wu et al. 2015), ce paramètre doit être compris entre -0,05 et 0,15 afin que la solution de l'équation Eq. II-1 du chapitre 2 soit indépendante de la méthode d'extrapolation (Figure III- 4b). Comme on peut le voir sur la Figure III- 4b, seules quelques expériences dans des conditions très pauvres et très riches ne sont pas dans cette plage. Les vitesses de flamme laminaires respectives non étirées et les longueurs de Markstein dépendent alors de la méthode de traitement choisie.

La Figure III- 5 présente la comparaison de la vitesse de flamme laminaire à étirement nul S_L^0 du mélange propane/air à 300K et 100 kPa avec certaines données de la littérature. Comme décrit dans le chapitre 1 (tableau II-3), Takizawa et al. (Takizawa et al. 2005) ; Tang et al (Tang et al. 2008) ; Huzayyin et al. (Huzayyin et al. 2008) ; Razus et al. (Razus et al. 2010) Hu et al. (Hu, et al. 2013) ont utilisés la méthode de la bombe sphérique pour déterminer S_L^0 et Bosschaart et de Goey (Bosschaart et De Goey 2004) un brûleur adiabatique à flamme plate. Comme on peut le voir sur la Figure III- 5, une courbe en cloche est obtenue dont la vitesse de flamme maximale est observée pour un rapport d'équivalence d'environ 1,1.

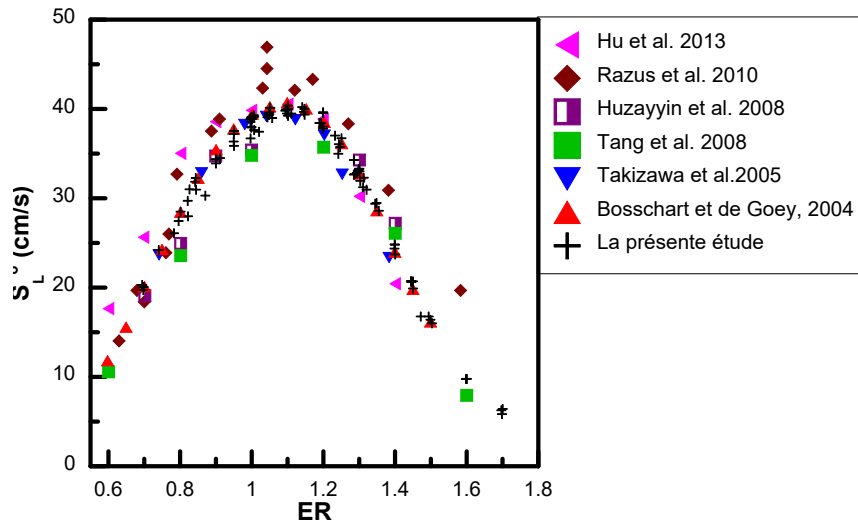


Figure III- 5 : Comparaison de la vitesse de flamme laminaire à étirement nulle S_L^0 avec les données issues de la littérature pour un mélange de C_3H_8 /air à 300K et 100 kPa

Pour le mélange pauvre en carburant, les mesures de Tang et al (Tang et al. 2008) et Huzayyin et al. (Huzayyin et al. 2008) sont inférieures que celles obtenues dans le cadre de cette thèse. On constate aussi que les mesures de S_L^0 de Hu et al. (Hu, et al. 2013) aux faibles rapports d'équivalence sont supérieures aux données expérimentales présentées ici. On observe également que la vitesse de flamme laminaire S_L^0 mesurée dans le cadre de cette thèse est en parfait accord avec les données de Bosschaart et de Goey (Bosschaart et De Goey 2004) et Takizawa et al. (Takizawa et al. 2005) sur tout le domaine de rapports d'équivalence, ce qui n'est pas le cas avec les données Razus et al. (Razus et al. 2010).

2 Impact de l'ajout d'isopropyle de nitrate (IPN) dans le mélange à base de propane

2.1 Méthode de validation des données expérimentales

Le comportement des flammes lamineuses à 373K pour un mélange IPN/air à deux pressions (50 et 100 kPa) et celui d'un mélange propane-IPN/air à une pression de 100 kPa ont été étudiés

La Figure III- 6 présente un exemple de vérification des conditions isobares dans le domaine de rayons de flamme pris en compte dans la détermination de la vitesse de flamme laminaire.

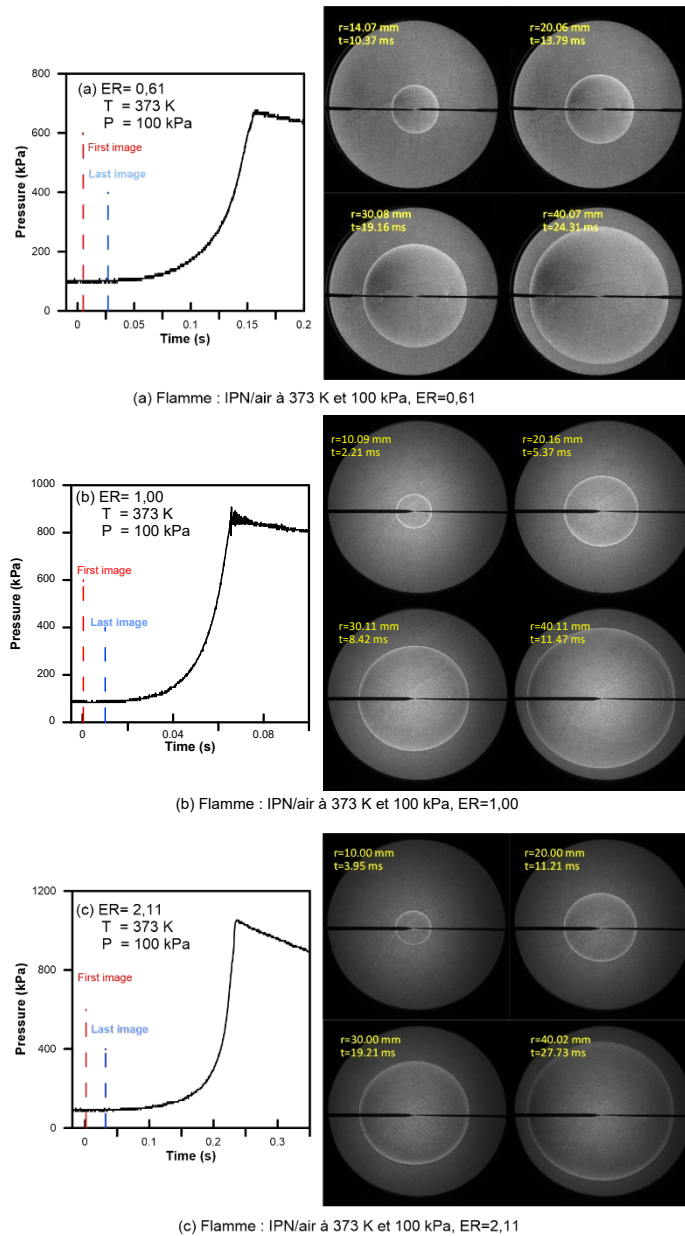


Figure III- 6 : Profil des pressions pour le mélange IPN/air à 100 kPa (1 bar) et 373 K pour : (a) un mélange pauvre en carburant (Rapport d'équivalence de 0,61) ; (b) le mélange stœchiométrique (Rapport d'équivalence de 1,02) et (c) un mélange riche en carburant (rapport d'équivalence à 2,11).

Comme il est possible l'observer sur la Figure III- 6, quel que soit le rapport d'équivalence étudié, la pression est constante. Cela est dû au domaine de visualisation limité correspondant à un diamètre de 97 mm alors que le diamètre interne de la bombe est de 473 mm.

Comme dans le cas du propane, le produit de nombre Markstein et de Karlovitz, $Ma_{linear} \cdot Ka_{middle}$, a été calculé afin de vérifier la faible influence liée à la méthode d'extrapolation dans le cas du mélange IPN/air et du mélange propane/IPN/Air dans les conditions suivantes 90% C_3H_8 +10%IPN/air. Les résultats sont présentés sur la Figure III- 7.

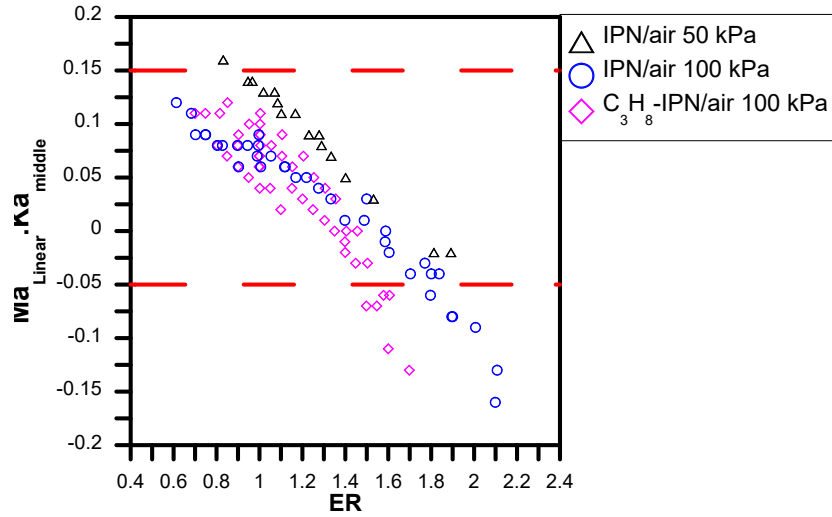


Figure III- 7 : Produit $Ma_{linear} \cdot Ka_{middle}$ en fonction du rapport d'équivalence pour le mélange IPN/air à 50 kPa (symboles noirs) ; IPN/air (symboles bleus) et 90% C_3H_8 +10%IPN/air (symboles roses) à 100 kPa et 373 K.

Comme on peut l'observer sur la Figure III- 7, dans la majorité des cas, le produit $Ma_{linear} \cdot Ka_{middle}$ est à l'intérieur du domaine représenté par des lignes pointillées rouges, ce qui signifie que la méthode d'extrapolation a un faible impact sur la détermination de la vitesse de flamme laminaire à étirement nul, S_L^0 . Seules quelques conditions sont en dehors des valeurs limites. Cela s'explique, comme indiqué par Wu et al. (Wu et al. 2015) principalement par le fait que le nombre de Lewis est différent de 1. Ainsi, il est possible de conclure que l'impact de l'extrapolation n'est pas significatif et qu'il n'introduit pas d'incertitude supplémentaire sur les vitesses de flamme laminares de la présente étude.

Au cours de sa propagation, une flamme subit des pertes thermiques dues aux pertes par rayonnement des gaz brûlés. En conséquence, la température de la flamme baisse ce qui conduit à une diminution de la vitesse de flamme laminaire (Jayachandran, Zhao, et Egolfopoulos 2014) (Santner et al. 2014) (Yu et al. 2014). Selon Santner et al. (Santner et al. 2014), les pertes radiatives peuvent constituer une source importante d'incertitude expérimentale dans les mesures de vitesse de flamme en bombe sphérique. L'équation III.1 (ci-dessous) peut être utilisée pour évaluer l'écart entre la vitesse de flamme laminaire mesurée en bombe sphérique et la vitesse de flamme laminaire prenant en compte les pertes radiatives, appelée aussi Radiation-Corrected Flame Speed, RCFS, (Yu et al. 2014). Les résultats sont présentés sur la Figure III- 8.

$$S_{L,RCSF}^0 = S_{L,exp}^0 + 0.82 \cdot S_{L,exp}^0 \cdot \left(\frac{S_{L,exp}^0}{S_0} \right)^{-1.14} \cdot \left(\frac{T_{ini}}{T_0} \right) \cdot \left(\frac{P_{ini}}{P_0} \right)^{-0.3} \quad \text{Eq.III-1}$$

avec $S_0 = 1 \text{ cm.s}^{-1}$, $T_0 = 298 \text{ K}$ and $P_0 = 101,325 \text{ kPa}$.

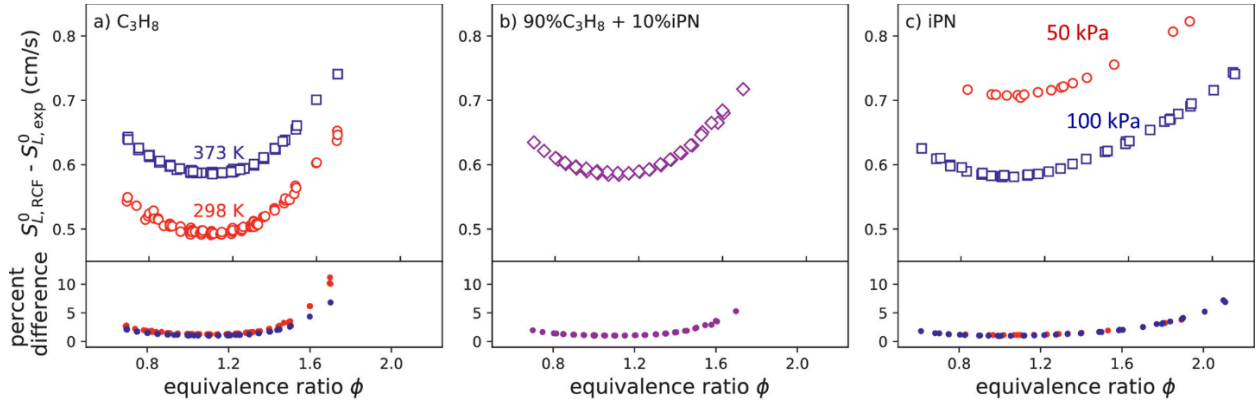


Figure III- 8 : Correction apportée à S_L^0 pour les pertes radiatives en fonction du rapport d'équivalence pour les différents mélanges (Yu et al. 2014) : (a) C_3H_8 /air à 100 kPa ; (b) $90\%C_3H_8+10\%iPN$ /air à 100 kPa et 373K et (c) iPN /air à 373K

La Figure III- 8 représente la correction apportée sur S_L^0 pour les pertes radiatives en fonction du rapport d'équivalence pour les différents mélanges : C_3H_8 /air, $90\%C_3H_8+10\%iPN$ /air et iPN /air et le pourcentage d'erreur. Comme on peut le constater sur la Figure III- 8, l'effet du rayonnement peut être négligée autour des conditions stœchiométriques, où la correction représente moins de 2 % de la vitesse de flamme mesurée. La correction à apporter augmente pour les vitesses de flamme plus lentes aux extrêmes, et est plus prononcée pour les flammes riches en carburant.

2.2 Comparaison entre la vitesse de flamme laminaire expérimentale et simulée

Les vitesses de flamme laminaire S_L^0 ont été déterminées numériquement à l'aide du logiciel CANTERA (version 2.5.0) par le Professeur Goldsmith de l'université de Brown avec lequel une collaboration existe. CANTERA est un logiciel open source de cinétique chimique, largement employé pour résoudre des écoulements réactifs laminaires. Les critères de raffinement de maillage ont été fixés comme suit pour les vitesses de flamme laminaires : rapport =3 ; pente= 0,025 ; courbe=0,025 (Fuller et al. 2022). Ces critères ont abouti à un maillage final de 600 points. Les calculs ont convergé. Le mécanisme réactionnel a été développé par le Professeur Goldsmith.

Sur la Figure III- 9, les résultats de nos données expérimentales et avec les simulations numériques sont comparés pour les différents mélanges étudiés.

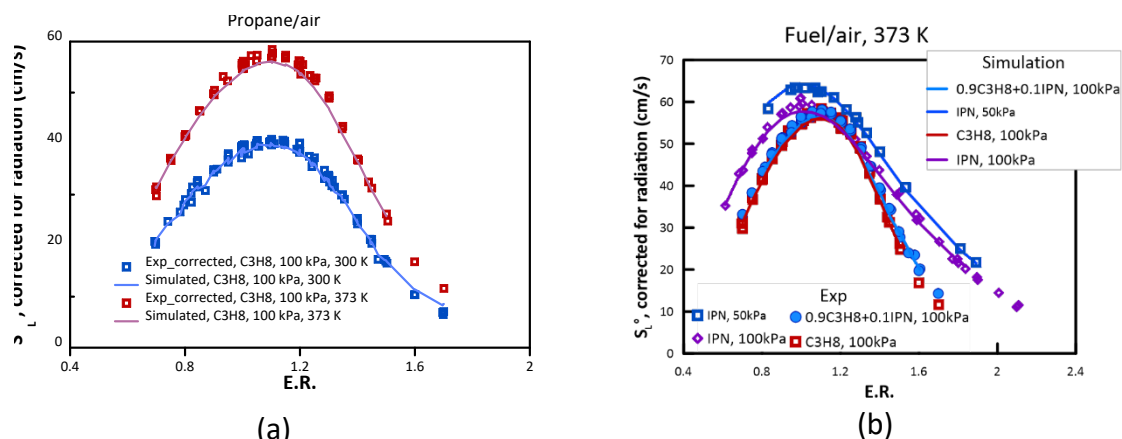


Figure III- 9 : Comparaison de vitesses de flammes laminaires expérimentales et simulées pour des mélanges dans l'air : (a) de C_3H_8 à 100 kPa et à 300K et 373K et (b) pour 373K : d'IPN à 50 et 100 kPa et 373 K ; $0,9C_3H_8+0,1IPN$ à 100 kPa ; C_3H_8 à 100 kPa

La Figure III- 9a présente les vitesses de flamme pour le propane à 100 kPa et à 300 K et 373 K. Il est important de noter que les résultats de simulation présentés sur la Figure III- 9a ont été obtenus pour la température et la pression initiales réellement mesurées lors de cette expérience, et non pour une température et une pression moyenne ; la régularité apparente de la courbe témoigne de la précision de la procédure de préparation. Ces données sont présentées comme des références de validation pour le mécanisme IPN- C_3H_8 . Les données numériques sur la vitesse de flamme pour les mélanges propane-air à 100 kPa et 300 K sont extraites des travaux de (Qin et al. 2000), (Zhao et al. 2004) , (Jomaas et al. 2005), et (Lowry et al. 2011).

La Figure III- 9b illustre les vitesses de flamme de l'IPN à 373 K et aux pressions de 50 et 100 kPa. Sont également représentées les vitesses de flamme pour un mélange de 90% de $C_3H_8+10\%$ IPN à 100 kPa et 373 K. Tout comme pour les flammes d'alcane pur, les résultats expérimentaux et simulés sont en parfait accord ce qui montre que la capacité du mécanisme réactionnel à prédire ce paramètre dans ces conditions. Dans le cas d'un rapport d'équivalence de 1,8 (ER ou $\phi = 1,8$), le modèle prédit correctement la vitesse de flamme pour les expériences à 50 kPa, mais il surestime la vitesse de flamme pour celles à 100 kPa.

Le domaine de mesure de la vitesse de flamme s'étend davantage pour l'IPN que pour le propane. L'ajout d'IPN modifie la dynamique de la flamme déplaçant le début du plissement dû aux instabilités thermo-diffusives vers le côté riche en carburant. Cette évolution est observée sur la Figure III-10 qui représente la longueur de Markstein des gaz frais L_u en fonction du rapport d'équivalence à 100 kPa et 373K.

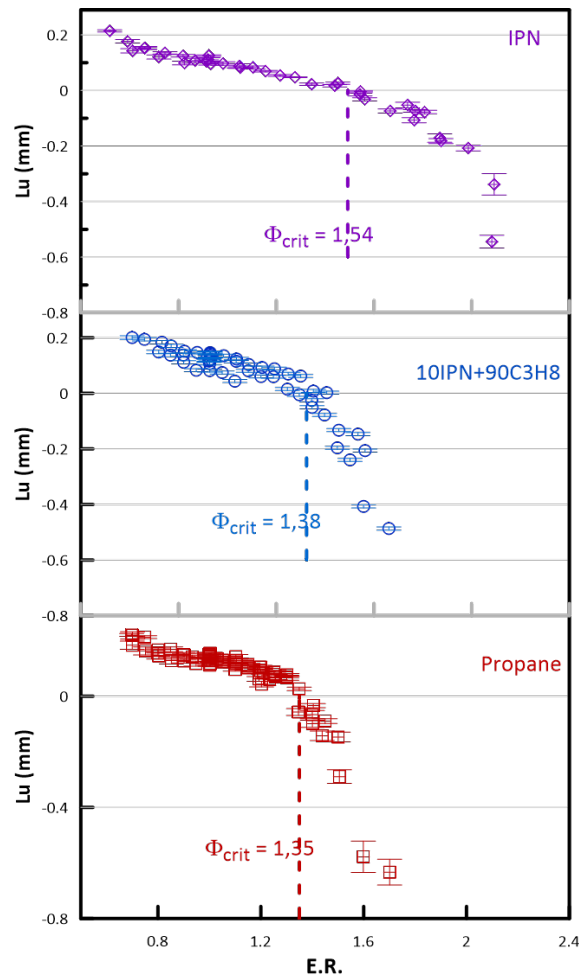


Figure III- 10 : Evolution de la longueur de Markstein des gaz frais en fonction du rapport d'équivalence pour les différents mélanges étudiés (IPN/air en violet, 10%IPN+90%C₃H₈/air en bleu et C₃H₈/Air en rouge) à 100 kPa et 373K

On observe d'après la Figure III- 10 que la longueur de Markstein L_u devient négative pour un rapport d'équivalence critique de 1,35 dans le cas du mélange propane/air. Tandis que pour le mélange 90%C₃H₈+10%IPN/air, le rapport d'équivalence critique est supérieur, de 1,38. Dans le cas des mélanges IPN/air, le rapport d'équivalence critique est encore supérieur et atteint la valeur de 1,54.

3 Etude des mélanges propène/air

Comme pour le propane, des nombreuses études ont été menées sur le propène, C₃H₆, pour la détermination de la vitesse de flamme laminaire. Malgré ces nombreuses données présentes dans la littérature, les incertitudes rapportées ne permettent pas une détermination appropriée des paramètres fondamentaux reposant uniquement sur des simulations cinétiques détaillées, tels que le nombre de Zeldovich et le nombre de Lewis effectif. En effet, ces propriétés reposent sur des simulations cinétiques détaillées qui, à leur

tour, nécessitent des vitesses de flamme précises avec des incertitudes très faibles. L'objectif de la présente étude est de déterminer avec précision les propriétés fondamentales de la combustion du mélange propène/air sur une large plage de rapport d'équivalence et à deux températures initiales, 298 et 373 K, à 100 kPa, à travers l'investigation de flammes sphériques laminares en expansion sphérique. La Figure III- 11 présente l'écart entre les vitesses de flamme laminaire mesurées en bombe sphérique et les vitesses de flammes laminares prenant en compte les pertes radiatives (appelé aussi Radiation-Corrected Flame Speed (RCFS)) évalué selon l'équation III-1.

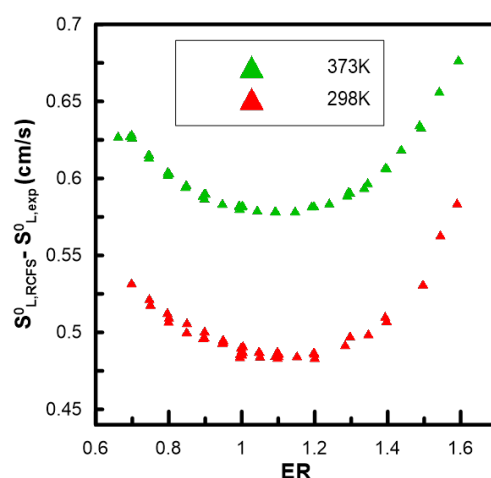


Figure III- 11 : Evaluation de la vitesse corrigée pour les pertes radiatives du mélange C_3H_6 /air à deux températures 298K et 373K à 100 kPa

Comme on peut le voir sur la Figure III- 11, les différences entre la vitesse de flamme laminaire obtenue expérimentalement et la vitesse de flamme corrigée pour les pertes radiatives varient de 0,48 à 0,68 $cm.s^{-1}$: les pertes sont minimales pour un rapport d'équivalence entre 0,85 et 1,35. Ce n'est que pour des mélanges très pauvres et très riches que la correction du rapport dépasse 0,5 $cm.s^{-1}$ à 298 K. L'augmentation de la température initiale conduit à une augmentation de la correction à appliquer.

Comme pour le mélange à base de propane, l'impact du modèle d'extrapolation le produit $Ma_{linear} \cdot Ka_{middle}$ sont représentés sur la Figure III- 12.

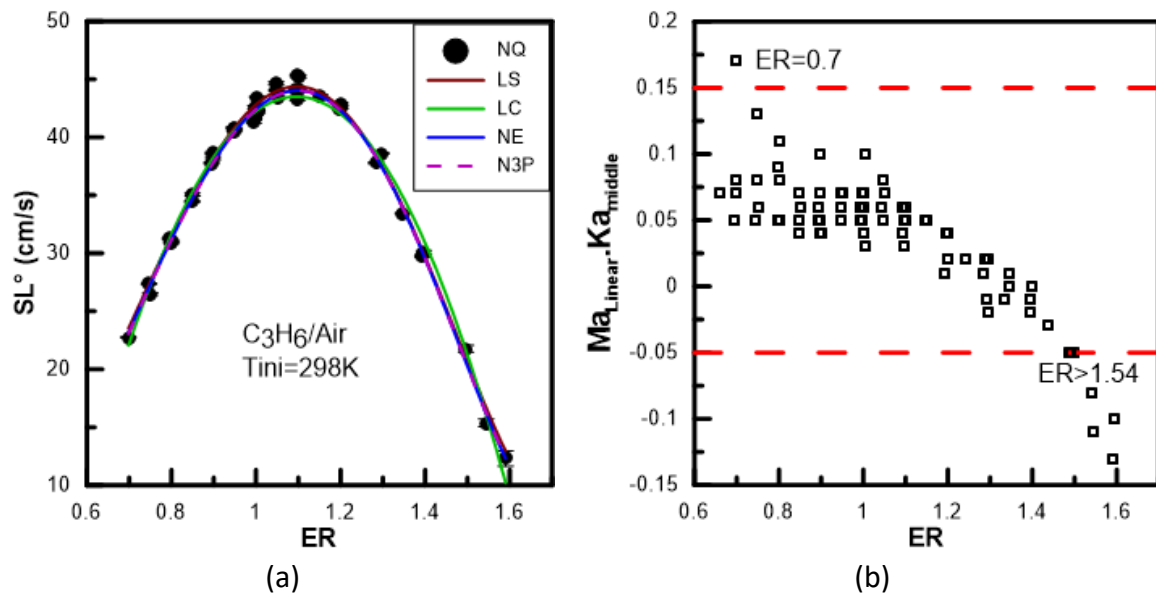


Figure III- 12 : (a) Comparaison de la vitesse de flamme laminaire SL° obtenue avec différents modèles d'extrapolation et (b) Produit $Ma_{linear} \cdot Ka_{middle}$, en fonction du rapport d'équivalence dans le cas du mélange propène/air à 298K et 373K pour 100 kPa

La Figure III- 12a montre que comme dans le cas du propane et celui de l'IPN, l'écart entre les modèles et les données expérimentales sont très faibles, quasi nul. De même, comme on peut l'observer sur la Figure III- 12b, seules quelques expériences sont hors de la limite de la recommandation délimitée par les deux droites rouges.

La Figure III- 13 compare la vitesse de flamme laminaire mesurée, S_L^0 , pour le propène dans cette étude et avec des résultats issus de la littérature à 298 K et 100 kPa, obtenus selon différentes méthodes expérimentales :

- méthode des flammes propagées sphériquement par Princeton (S.M. Burke et al. 2014), TAMU (S.M. Burke et al. 2014), Jomaas et al. (Jomaas et al. 2005) et Saeed and Stone (Saeed et Stone 2007),
- méthode des brûleurs à flux thermique par VUB (a), Lund et Nancy (S.M. Burke et al. 2014),
- enfin, la méthode des flammes à contre-courant par Davis & Law (Davis et Law 1999).

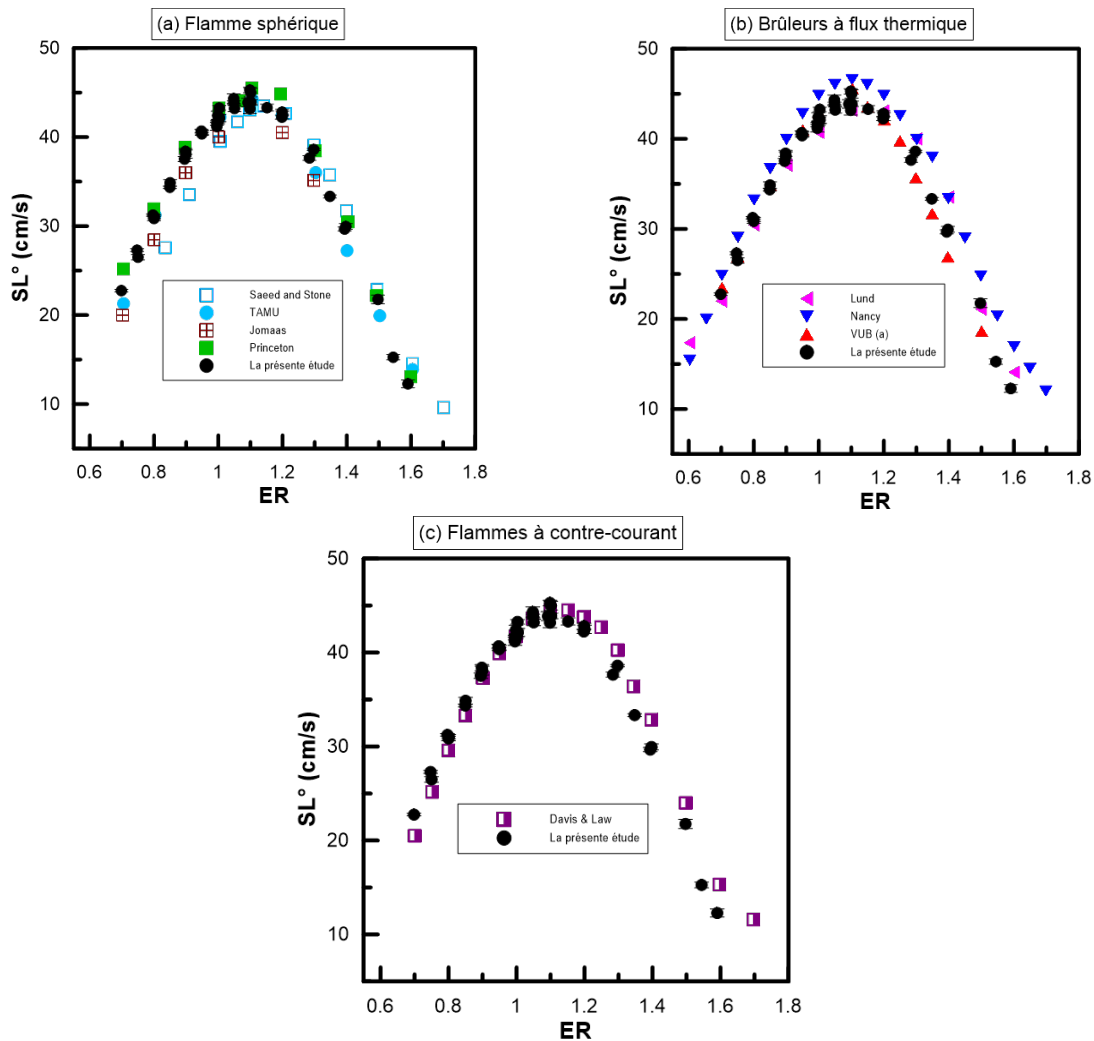


Figure III- 13 : Comparaison de l'évolution de la vitesse de flamme laminaire SL^0 mesurée dans cette étude dans le cas des mélanges C_3H_6/Air à 100 kPa et 298 K en fonction du rapport d'équivalence avec celles mesurées (a) en flamme sphérique ; (b) dans des brûleurs à flux thermique et (c) dans des brûleurs à contre-courant.

La Figure III- 13a représente les vitesses de flamme laminares obtenues par la méthode de la bombe sphérique à 298 K et 100 kPa. Comme on peut le voir, du côté des faibles valeurs du rapport d'équivalence (côté pauvre), on observe un très bon accord entre toutes les mesures, à l'exception des données rapportées par Saeed and Stone (Saeed et Stone 2007) qui sont significativement plus basses. Du côté des rapports d'équivalence élevés (côté riche), l'écart entre les différents auteurs est plus important et le travail présenté ici s'accorde assez bien avec les données des groupes TAMU et Princeton (S.M. Burke et al. 2014). Dans le cas du brûleur à flux thermique (Figure III- 13b), nos données concordent très bien avec celles de VUB, tandis que les données de Lund et Nancy sont significativement plus élevées que celles de VUB (même méthode). Enfin, dans le cas du brûleur de flamme à contre-courant (Figure III- 13c), on observe un très bon accord avec les données de Davis and Law (Davis et Law 1999) du côté

des faibles rapports d'équivalence, tandis que leurs données sont systématiquement plus élevées du côté des rapports d'équivalence élevés. Il est à noter que la plus grande dispersion des données est observée près de la stœchiométrie et pour des conditions riches. La longueur de Markstein des gaz frais est déterminée en utilisant l'équation Eq. I-37 du chapitre 1 ($L_u = \frac{L_b}{\sigma}$) et les résultats sont présentés sur la Figure III- 14 en fonction du rapport d'équivalence pour deux températures initiales.

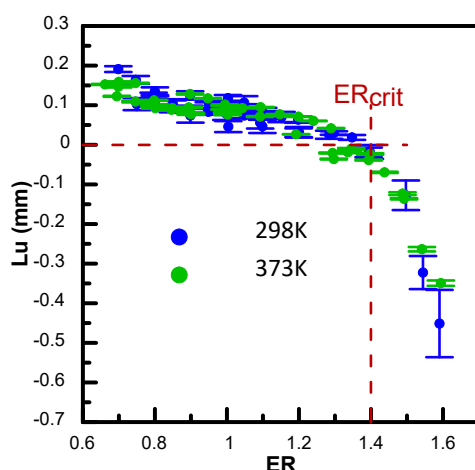


Figure III- 14 : Evolution de la longueur de Markstein de gaz frais pour le mélange C_3H_6/Air at 100 kPa à 298 et 373K en fonction du rapport d'équivalence.

Comme on peut le voir sur la Figure III- 14, L_u devient négatif pour un rapport d'équivalence critique de $ER_{crit} = 1,4$ pour les mélanges C_3H_6/air pour les deux températures, ce qui reflète des instabilités thermo-diffusives. L'augmentation de la température initiale ne change pas la valeur de la longueur de Markstein.

La Figure III- 15 représente les vitesses de flamme laminaire expérimentales et simulées, pour deux températures, 298 K (couleur bleue) et 373 K (couleur verte), à 100 kPa. Les symboles correspondent aux résultats expérimentaux et la ligne correspond à la simulation. Le mécanisme UCSD (University of California San Diego) 2016 a été utilisé.

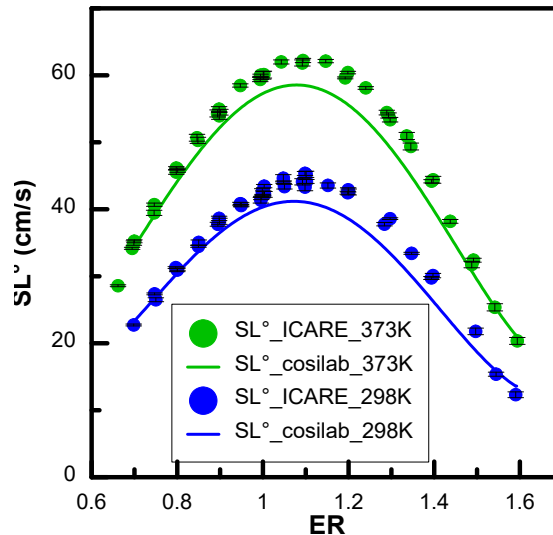


Figure III- 15: Comparaison de l'évolution de la vitesse de flamme laminaire SL^0 calculée et simulée avec le logiciel COSILAB (COSILAB 2009) en fonction du rapport d'équivalence dans le cas du mélange C_3H_8 /air à 100 kPa à 298 K (bleu) et 373 K (vert) : les symboles correspondent aux résultats expérimentaux et le trait plein à la simulation issue avec le mécanisme réactionnel UCSD 2016.

Comme indiqué sur la Figure III- 15, la vitesse de la flamme augmente avec l'augmentation de la température initiale, comme attendu. Dans l'ensemble, un bon accord est obtenu entre les résultats expérimentaux et simulés en utilisant le mécanisme UCSD 2016 pour les mélanges de faibles et de forts rapports d'équivalence. Cependant, le modèle sous-estime la vitesse de flamme laminaire autour de la stœchiométrie pour un rapport d'équivalence compris entre 1 et 1,3.

Comme mentionné précédemment, les paramètres de combustion pour les analyses de sécurité sont dérivés de la vitesse de flamme laminaire, tels que la vitesse de flamme laminaire, l'épaisseur de flamme, le nombre de Lewis effectif, l'énergie d'activation E et donc le nombre de Zel'dovich β .

4 Calcul des paramètres fondamentaux de la combustion

4.1 Epaisseur de la flamme

En raison des nombreuses théories qui existent sur la propagation des flammes laminares (thermique, diffusion et globale), il existe également plusieurs façons de définir l'épaisseur d'une flamme laminaire. Cependant, la définition la plus largement utilisée reste celle établie par Zel'dovich (Glassman 1997). Cette dernière est basée sur la théorie de Mallard

et Le Châtelier qui divise le front de flamme en deux parties : une zone de préchauffage et une zone de réaction. L'épaisseur de la zone de préchauffage δ_p résulte d'un équilibre entre la diffusion thermique et la diffusion des espèces (équation Eq. II-22 du chapitre 1 : $\delta_p = \frac{\lambda}{C_p \rho_0 S_L^o}$).

Les paramètres λ , ρ_0 , C_p peuvent être déduits des calculs d'équilibre thermodynamique effectués à l'aide du code COSILAB «Equilibrium» effectués dans des conditions isobare et adiabatique.

L'autre méthode est basée sur le profil de température dans le front de flamme selon l'équation III-2, qui est obtenue lors de la simulation de la vitesse de flamme laminaire à l'aide du code " one dimensional freely propagating flame " décrite dans le paragraphe outil numérique du chapitre 2.

$$\delta_{gradT} = \frac{T_f - T_{ini}}{\left(\frac{dT}{dx}\right)_{max}} \quad (Eq. III-2)$$

La Figure III- 16 présente l'épaisseur de flamme en fonction du rapport d'équivalence basé sur le gradient de température (δ_{gradT}) pour tous les mélanges considérés dans la présente étude à savoir C_3H_8 /air, C_3H_6 /air, IPN/air et 90% C_3H_8 +10%IPN à 298 et 373 K.

Comme on peut le voir sur la Figure III- 16a, à 373 K (Figure du haut), on observe une légère augmentation de l'épaisseur de la flamme dans le cas du propane des faibles rapports d'équivalence jusqu'à une richesse de 1,1 comparé à C_3H_6 . Dans la Figure III- 16b, on voit que l'épaisseur augmente avec la diminution de la pression de l'IPN. Dans la même Figure, on constate que l'épaisseur de l'IPN pure est plus grande que celui du propane entre ER=1 à 1,4. Cette remarque peut être aussi faite dans le cas du mélange avec l'ajout de l'IPN. En outre, l'addition de l'IPN a un léger impact sur l'épaisseur de la flamme. En conclusion et comme prévu, l'augmentation de la température initiale de 298 K à 373 K entraîne une diminution de l'épaisseur de flamme pour tous les mélanges.

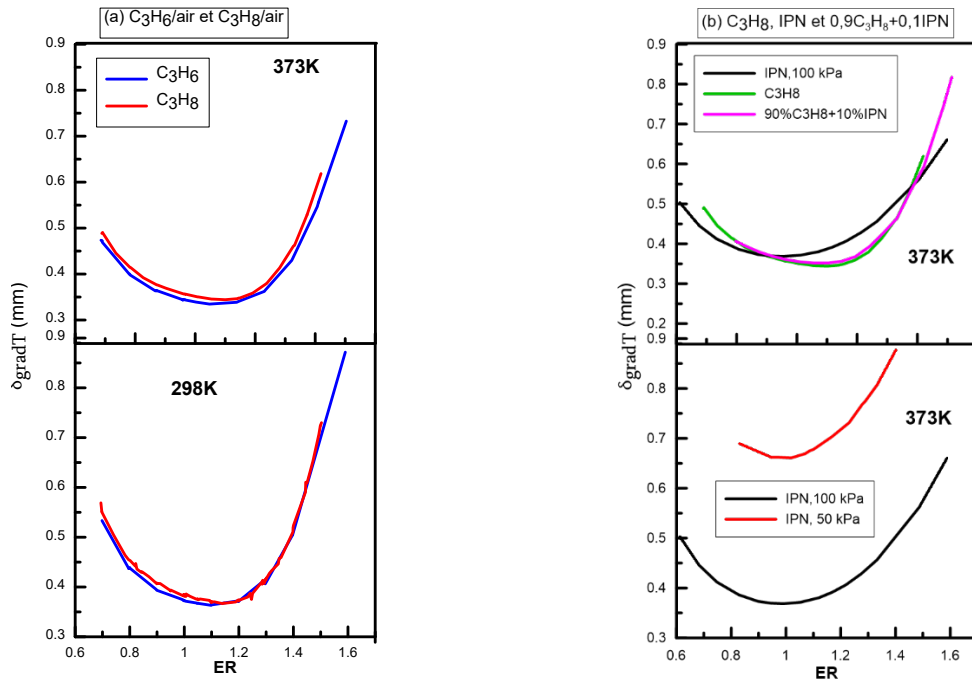


Figure III- 16 : Evolution de l'épaisseur de la flamme en fonction du rapport d'équivalence pour les différents mélanges dans l'air suivants : (a) C_3H_6 et C_3H_8 à 100 kPa et (b) C_3H_8 , IPN et $90\%C_3H_8+10\%IPN$.

4.2 Nombre Zel'dovich, nombre de Lewis effectif et énergie d'activation

Comme décrit dans la section 2.1.2., différentes méthodes peuvent être utilisées pour calculer l'énergie d'activation d'un mélange réactionnel. Pour tous les mélanges étudiés (C_3H_6 /air, C_3H_8 /air, IPN/air et $90\%C_3H_8+10\%IPN$ /air), la procédure d'estimation de l'ordre de réaction effectif dans une explosion à pression constante impliquant plusieurs équations et dérivations interconnectées a été utilisée. Cette procédure consiste à faire intervenir le détail d'inflammation qui permet d'identifier le temps auquel le gradient de température est maximal.

En ce qui concerne, le calcul de nombre de Lewis effectif, l'équation Eq. II-25 du chapitre 1 est utilisé. La Figure III- 17 présente les valeurs des nombres de Lewis effectifs pour les mélanges considérés dans la présente étude.

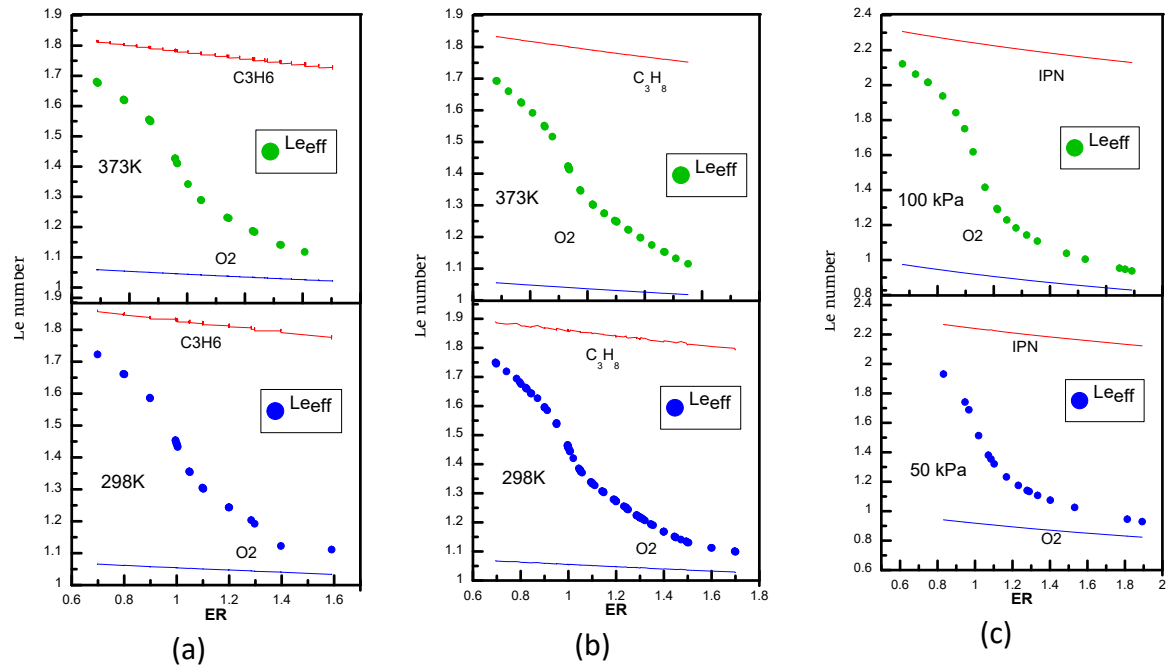


Figure III- 17 : Evolution du nombre de lewis effectif (symbole) en fonction du rapport d'équivalence pour le propène et le dioxygène à 100 kPa, 298 K et 373 K (a), le propane et le dioxygène à 100 kPa, 298 K et 373 K (b), l'isopropyle de nitrate et le dioxygène à 50 kPa et 100 kPa à 373 K (c)

Le nombre de Lewis effectif Le_{eff} est entre le nombre de Lewis calculé pour le propène C_3H_6 ou C_3H_8 ou IPN et pour le O_2 (Figure III- 17a, b et c). Les nombres de Lewis des réactifs (C_3H_6 ou C_3H_8 ou IPN et O_2) sont également représentés afin d'illustrer que Le_{eff} du mélange est influencé par le carburant C_3H_6 ou C_3H_8 ou IPN dans des conditions pauvres et par le dioxygène (comburant) O_2 dans des conditions riches. Il est important de noter que les valeurs de Le_{eff} sont supérieures à 1 ce qui montre que les flammes étudiées sont stables. L'augmentation de la température entraîne une diminution du nombre de Lewis et par conséquent de Le_{eff} .

L'évolution de l'énergie d'activation globale et du nombre de Zeldovich β en fonction du rapport d'équivalence est présentée sur la Figure III- 18.

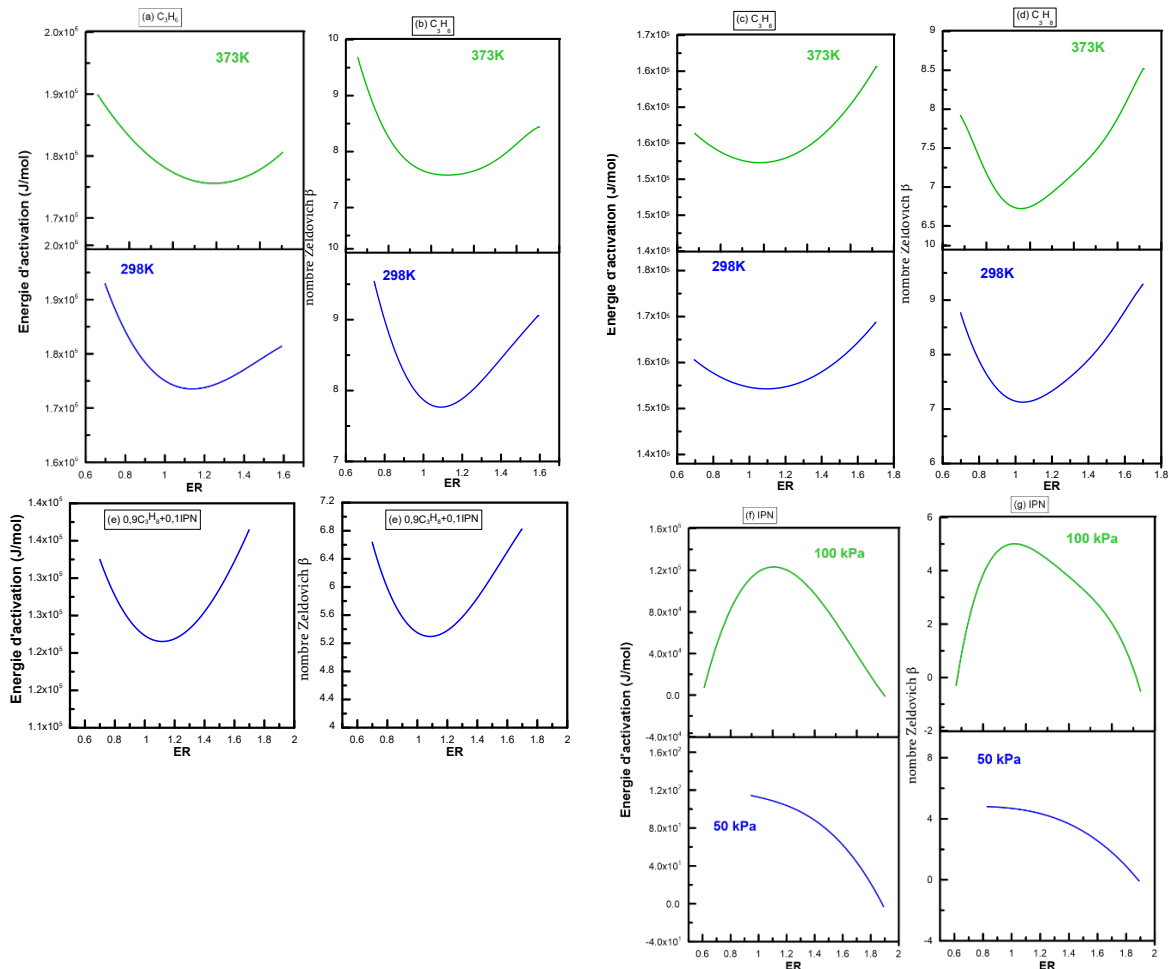


Figure III- 18 : Evolution du nombre de Zel'dovich (figure de gauche) et de l'énergie d'activation (figure de droite) en fonction du rapport d'équivalence pour les différents mélanges : a,b) dans l'air à 100 kPa pour le C_3H_8 $T=298K$, $373K$; c,d) C_3H_8 à $P=100$ kPa et $T=298K$, $373K$; e ,f) $90C_3H_8+10\%$ $373K$ $P=100$ kPa et g,h) pour l'IPN à $T=373K$ et $P=50$ kPa , 100 kPa.

Pour le propane, l'IPN et 90% propane+10% IPN, le mécanisme réactionnel du Professeur Goldsmith est utilisé. Quant au propène, celui de Polimi 2022 a été utilisé.

Dans chaque cas sauf celui de l'IPN, la valeur minimale du nombre de Zel'dovich β est obtenue pour le rapport d'équivalence correspondant à la vitesse de flamme laminaire la plus élevée. Comme on pourrait le prévoir intuitivement, la réactivité des mélanges étudiés augmente avec la température. La diminution du nombre de Zel'dovich β avec l'augmentation de la température initiale est également observée. Avec l'apparition des instabilités thermo-diffusives à partir d'une valeur du rapport d'équivalence autour de : cas du propane : 1,35 ; cas du propène :1,4 et cas du mélange 90%propane+10%IPN : 1,38) le système devient très instable. Comme on peut le voir sur la Figure III- 18, les évolutions du nombre de Zel'dovich sont très bien reproduites pour l'énergie d'activation totale. L'IPN pur a une allure différente des autres.

Conclusion

Dans le présent travail, la vitesse de flamme laminaire pour une température initiale de 298 K et de 373 K pour les mélanges C_3H_6 /air, C_3H_8 /air et de 373 K pour les mélanges 90% C_3H_8 +10%IPN/air et IPN/air à 50 kPa et 100 kPa a été déterminée par la méthode de la bombe sphérique

L'ajout d'isopropyle de nitrate au propane impacte la vitesse de la flamme et le régime de propagation pour des grandes et des faibles richesses.

Les modèles de cinétiques chimiques pour décrire la combustion du propane, de l'IPN (Goldsmith (Fuller et al. 2022)) et du propène (UCSD 2016) ont été utilisés pour simuler les vitesses de flamme laminaire déterminées expérimentalement. Les résultats des comparaisons montrent que le modèle cinétique du Professeur Goldsmith est en parfait accord avec les mesures expérimentales alors que le modèle de l'UCSD 2016 pour le propène sous-estime la vitesse de flamme pour des rapports d'équivalence compris entre 1 et 1,3. Ces deux modèles ont été ensuite utilisés pour calculer des paramètres importants suivants : l'épaisseur de la flamme δ_{gradT} , le nombre de Lewis effectif Le_{eff} , le nombre de Zel'dovich β et l'énergie d'activation globale E qui sont des paramètres fondamentaux pour effectuer des analyses de sécurité des moteurs à détonations pulsés.

Chapitre IV – Etude de la Transition vers la Détonation

Dans ce chapitre, l'impact de l'ajout de 10% d'iso-propyl-nitrate (IPN) sur les conditions critiques de la détonation des mélanges stœchiométriques de propane avec et sans ajout d'azote est présenté. Les expériences ont été réalisées dans le tube de détonation décrit dans le chapitre 2. Le but est de déterminer si l'ajout d'IPN augmente la sensibilité à la détonation des mélanges à base de propane. Pour ce faire, deux types de paramètres ont été mesurés. D'une part, les conditions critiques de pression et de température nécessaires à l'initiation d'une détonation dans les mélanges Propane/IPN/O₂/N₂. Et, d'autre part, dans le cas de l'obtention d'une détonation auto-entretenu, les vitesses de détonation et les tailles de cellules. L'ensemble de ces paramètres permettent d'estimer la sensibilité à la détonation des mélanges étudiés. Enfin, l'étude de la sensibilité à la détonation, via la mesure des cellules de détonation, de mélanges propène/O₂ avec et sans diazote a également été menée.

1 Résultats du TCD obtenus pour les mélanges propane/IPN

1.1 Mesure de la vitesse de l'onde

Comme cela a été décrit dans le chapitre 2, la vitesse de l'onde est déterminée à l'aide des capteurs SD, affleurant l'intérieur du tube, qui indiquent une montée rapide de la tension lors du passage de l'onde de détonation. Les capteurs SD ont une zone de détection très fine (temps de montée de 0,4 μ s, 0,75 mm²), ce qui contribue à réduire l'incertitude associée aux mesures de vitesse de l'onde. Cependant, ils sont très sensibles aux transferts de chaleur, ce qui les rend inappropriés pour mesurer la pression derrière les ondes. C'est pourquoi, la mesure de la pression derrière les ondes est plutôt effectuée à l'aide des capteurs piézoélectriques PCB. La Figure IV - 1 illustre un exemple d'enregistrement des profils de pression mesurés par les huit capteurs piézoélectriques et les 14 capteurs SD sur les 7 oscilloscopes à mémoire 4 canaux (de type Rohde & Schwarz RTB2004 ; 2,5 GSa/s) pour une onde de choc et une détonation stable. Pour chaque capteur, le pic de pression détecté correspond au passage de l'onde de choc incidente à la position du capteur.

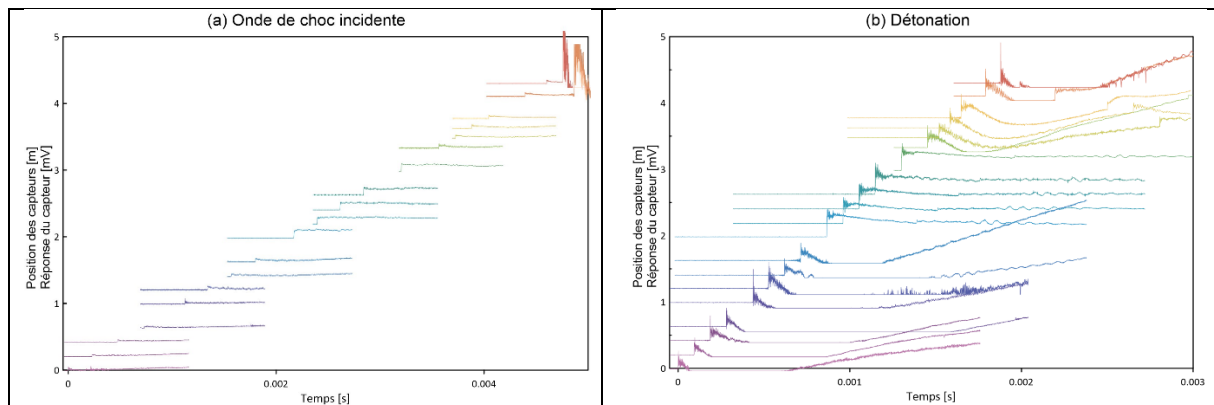


Figure IV - 1 : Exemple des signaux émis par les capteurs de pression lors du passage d'une onde de choc incidente (a) sans transition vers une détonation, (b) avec transition vers une détonation dans le cas du mélange $C_3H_8-O_2$ à 13,3 kPa

Le temps correspondant à l'arrivée de l'onde de choc ou de l'onde de détonation est déterminé à partir de l'augmentation instantanée des signaux électriques délivrés par les capteurs. En connaissant les positions des capteurs, une corrélation polynomiale est utilisée pour décrire la trajectoire (x_{SDi} ou $x_{PCBi} = f(t_{SDi}$ ou $t_{PCBi})$). À partir de cette équation de trajectoire, la vitesse des ondes (onde de choc ou onde de détonation) est déduite (Vitesse = dx/dt) à chaque position du capteur.

2 Identification de la transition de l'onde de choc à la détonation

Chaque expérience est décrite comme présentant l'un des trois types de comportement suivants en fonction des vitesses observées à chaque emplacement des capteurs SD/PCB le long du tube :

- Onde de choc non réactive (OCNR) : aucune transition vers la détonation derrière l'onde de choc incidente, ce qui signifie que l'onde de choc n'a pas assez d'énergie pour déclencher directement une détonation (Figure IV - 1).
- Transition de l'onde de choc à la détonation (TOD) : transition vers la détonation observée après SD7, produit une onde de détonation forte, appelée aussi surpressée (overdriven en anglais), Figure IV - 2. Cette dernière voit sa vitesse diminuer le long du tube. Cependant, ce dernier n'est pas assez long pour atteindre une vitesse stable. Elles sont plus rapides que la vitesse de détonation de Chapman-Jouguet théorique D_{CJ} .

- Détonation stable (DS) : une transition vers une onde de détonation observée avant SD7 (Figure IV - 2), créant une onde de détonation stable sur toute la longueur du tube de choc. Les vitesses des ondes de détonation stables sont légèrement inférieures à la vitesse de détonation Chapman-Jouguet théorique D_{CJ} .

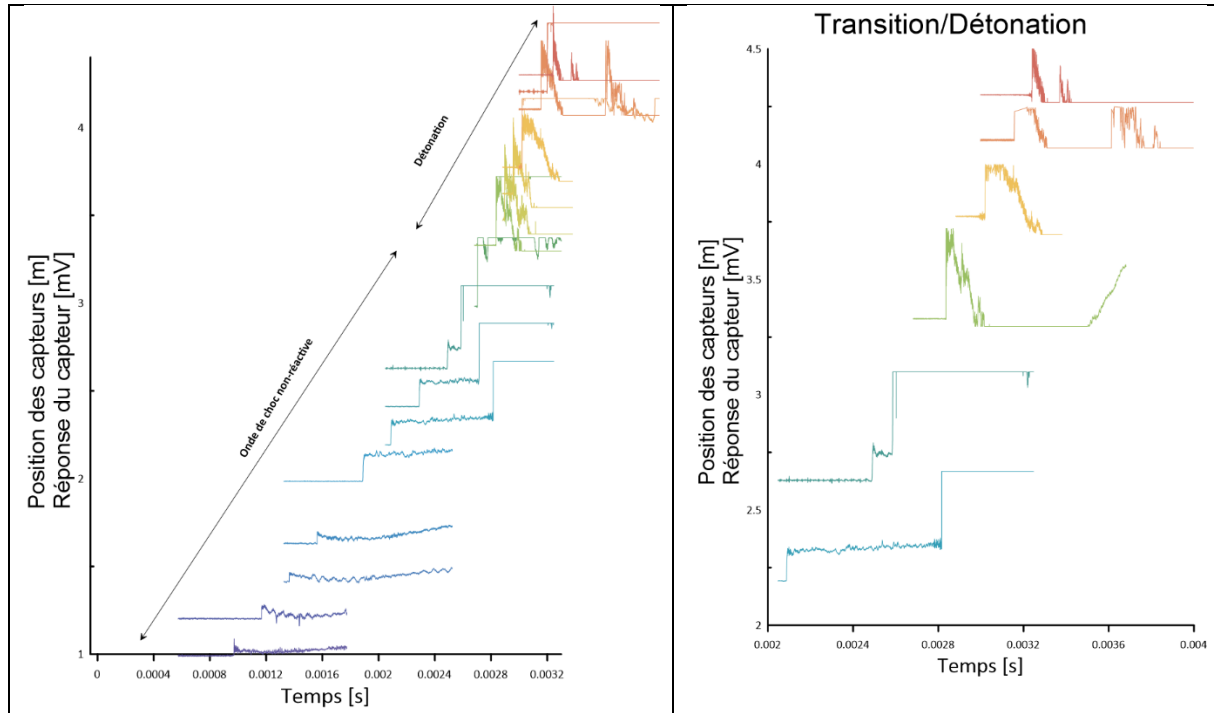


Figure IV - 2 : Exemple des signaux produits par les capteurs de pression avec des chocs non réactifs jusqu'à 3 m, suivi d'une transition vers une onde de détonation dans un mélange $C_3H_8-O_2$ initialement à 13,3 kPa.

La vitesse au niveau de chaque capteur (onde de choc ou détonation) est déterminée, à partir de la trajectoire de l'onde de choc, pour chaque position du capteur ($Vitesse = dx/dt$). Les conditions derrière l'onde de choc incidente, P_2 et T_2 sont calculées en utilisant les équations classiques de la dynamique des gaz (comme cela est implémenté dans le logiciel COSILAB (COSILAB 2009) pour chaque vitesse de choc. Pour un mélange explosif donné à une pression initiale P_1 , la transition d'une onde de choc vers une onde de détonation se produit lorsque les paramètres derrière l'onde de choc incidente dépassent une certaine valeur de pression et de température. Cette transition peut être caractérisée en traçant la vitesse d'onde en fonction de la pression P_4 du gaz moteur, ou en fonction du rapport $\frac{P_2 - P_1}{P_1}$.

Lorsqu'une détonation auto-entretenu est obtenue, la vitesse de détonation expérimentale est comparée à la vitesse de détonation de Chapman-Jouguet théorique déterminée à l'aide du code de calcul COSILAB (COSILAB 2009).

Quatre mélanges stœchiométriques ont été étudiés : (i) C_3H_8/O_2 , (ii) $\{0,1IPN+0,9C_3H_8\}/O_2$, (iii) $C_3H_8/O_2/N_2$, (iv) $\{0,1IPN+0,9C_3H_8\}/O_2/N_2$ avec $N_2/O_2=1,5$. Deux pressions initiales différentes ont été étudiées : 6,7 et 13,3 kPa. L'influence des propriétés de détonation a été étudiée en termes de dilution et de l'impact de l'ajout d'IPN.

Comme on peut le voir sur la Figure IV-3 pour les mélanges C_3H_8/O_2 , des ondes de choc non réactives sont observées pour une pression critique du gaz moteur P_{4crit} inférieure à 900 kPa. Lorsque la pression du gaz moteur dépasse cette valeur critique, une détonation se forme et se propage dans des conditions de Chapman-Jouguet. Lorsque l'IPN est ajouté au mélange, cette pression critique P_{4crit} chute à 400 kPa. L'ajout d'IPN favorise donc la transition vers la détonation à des nombres de Mach plus bas. Lorsque les mélanges sont dilués avec du diazote, la pression critique du gaz moteur P_{4crit} est de 1000 kPa pour les mélanges $C_3H_8/O_2/N_2$ et chute à 800 kPa lorsque l'IPN est ajouté au mélange. La limite entre les ondes de choc non réactives et la transition vers la détonation est beaucoup plus nette lorsque les vitesses des ondes sont exprimées en fonction du rapport $\frac{P_2-P_1}{P_1}$, comme le montre la Figure IV.3 (c) et (d). En effet, il faut garder à l'esprit que la pression du gaz moteur P_4 est un bon indicateur de la force de l'onde de choc, mais près de la limite, l'effet de l'ouverture de la membrane devient important et peut être responsable d'une plus grande divergence dans la définition de la limite entre les conditions conduisant à des ondes purement non réactives et celles conduisant au début d'une onde de détonation. Une conclusion identique peut être déduite des résultats présentés sur la Figure IV-4 : pour les mélanges C_3H_8/O_2 sans IPN de la Figure IV.4a, on passe d'une transition ($P_{4critique} = 500$ kPa) à une détonation stable avec l'ajout de l'IPN.

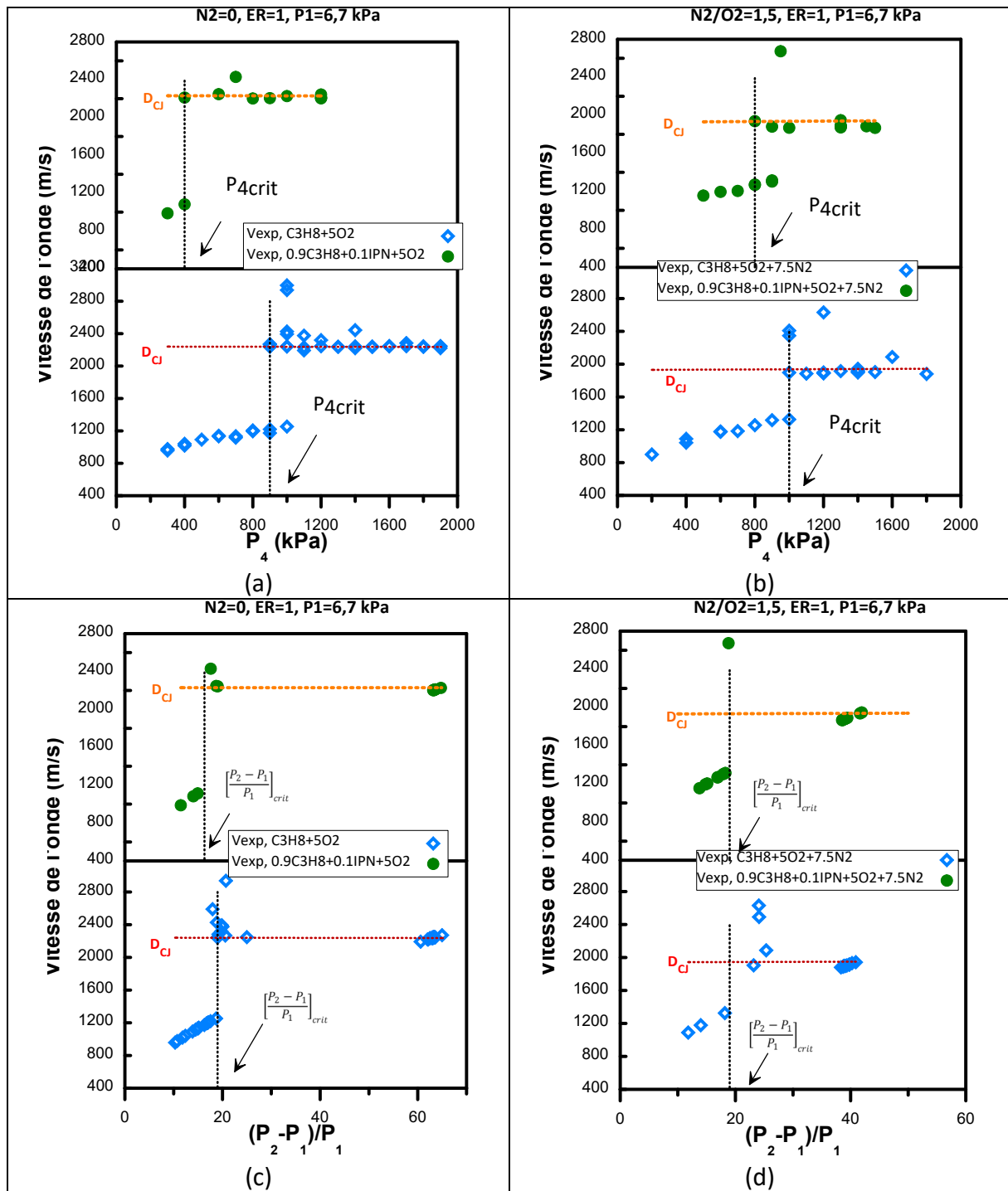


Figure IV - 3 : Vitesse de l'onde pour une pression initiale de 6,7 kPa pour des mélanges avec (figure du haut, symboles verts) et sans IPN (figure du haut, symboles bleus) en fonction (a,b) du de la pression P_4 du gaz moteur (a) et (bc,d) du rapport, et $(P_2 - P_1)/P_1$. (c) et (d) Symboles : V_{exp} de l'onde, les droites en pointillés : Célérité théorique de détonation de Chapman-Jouguet (D_{cj}). Les valeurs critiques (P_{4crit} et $[(P_2 - P_1)/P_1]_{crit}$) sont indiquées par une droite verticale.

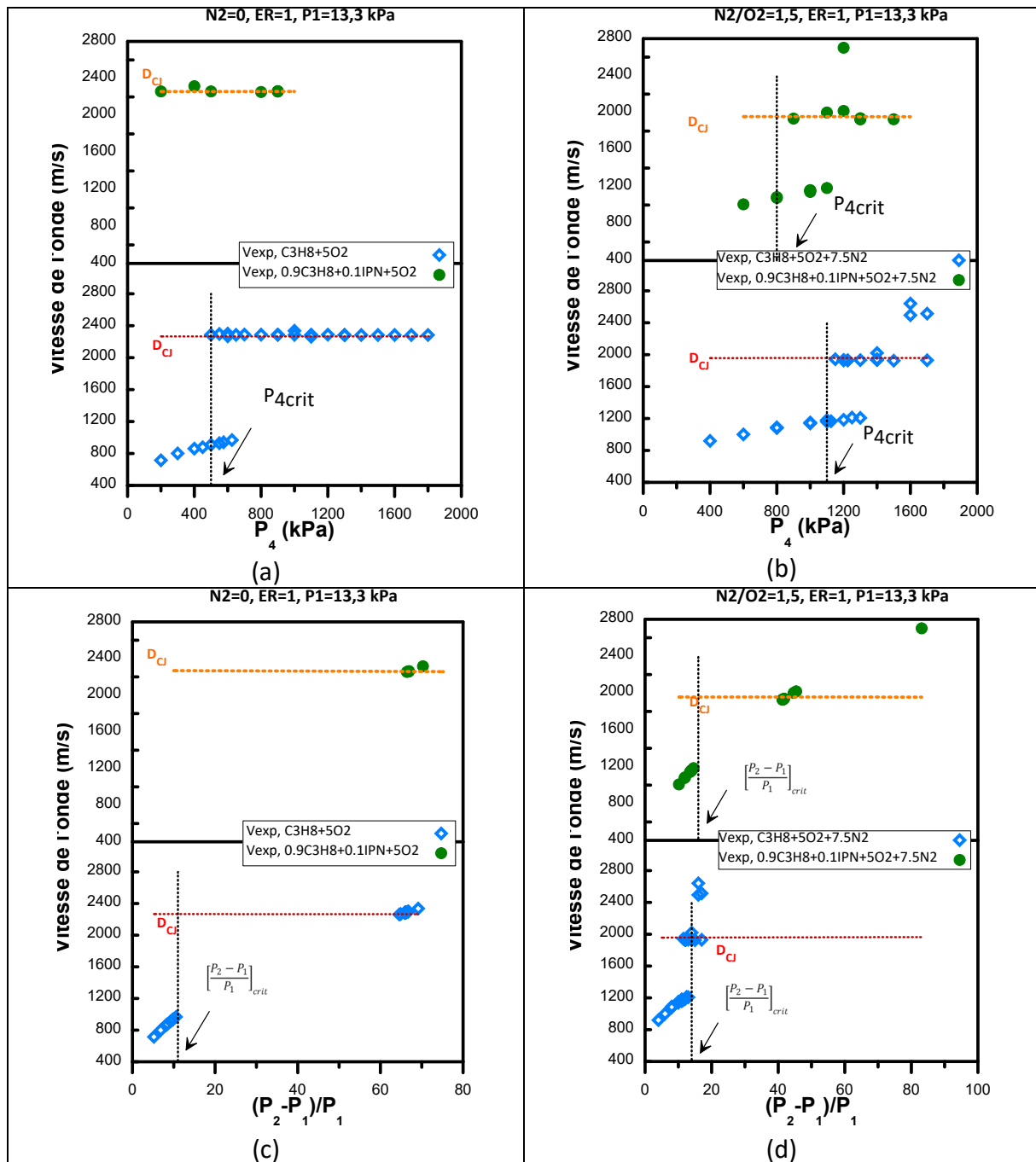


Figure IV - 4 : Vitesse de l'onde pour une pression initiale de 13,3 kPa pour des mélanges avec (figure du haut, symboles verts) et sans IPN (figure du haut, symboles bleus) en fonction (a,b) du de la pression P_4 du gaz moteur (a) et (bc,d) du rapport, et $(P_2 - P_1)/P_1$. (c) et (d) Symboles : V_{exp} de l'onde, les droites en pointillés : Célérité théorique de détonation de Chapman-Jouguet (D_{CJ}). Les valeurs critiques (P_{4crit} et $[(P_2 - P_1)/P_1]_{crit}$) sont indiquées par une droite verticale.

L'impact de l'ajout d'IPN sur les paramètres clés est résumé dans le 1, qui rassemble les valeurs critiques de pression et température $P_{4,crit}$, $T_{2,crit}$ et $P_{2,crit}$ nécessaires pour observer une détonation en fonction de la dilution au diazote et de la présence ou non d'IPN dans le mélange carburant pour les deux pressions d'étude (6,7 et 13,3 kPa).

Tableau IV - 1 : Comparaison des températures et des pressions de choc critiques $P_{4,crit}$; $P_{2,crit}$; $T_{2,crit}$, requises pour observer une détonation stœchiométrique dans le cas du mélange C_3H_8/O_2 avec et sans dilution au diazote N_2 et en présence ou absence d'IPN.

P _{ini} (kPa)	Mélanges Stœchiométriques	P _{4,crit} (kPa)	T _{2,crit} (K)	P _{2,crit} (kPa)	Taille de la cellule (mm)
Sans dilution au diazote					
6,7	C ₃ H ₈ /5 O ₂	900	806,2	122	11,6±3,13
	(0,9 C ₃ H ₈ +0,1 IPN) /5 O ₂	400	727,6	102	9,29±2,31
13,3	C ₃ H ₈ /5 O ₂	500	610,6	138	4,83±1,32
	(0,9 C ₃ H ₈ +0,1 IPN) /5 O ₂	Détonation			3,73±0,82
Avec dilution au diazote					
6,7	C ₃ H ₈ /5O ₂ /7,5 N ₂	1000	972,6	131	-
	(0,9 C ₃ H ₈ +0,1 IPN) / 5 O ₂ /7,5 N ₂	800	924,2	122	-
13,3	C ₃ H ₈ /5 O ₂ /7,5 N ₂	1100	832,2	200	-
	(0,9 C ₃ H ₈ +0,1 IPN) / 5 O ₂ /7,5 N ₂	800	794,5	188	-

2.1 Structure cellulaire : sensibilité à la détonation

La structure tridimensionnelle de l'onde de détonation auto-entretenu a été enregistrée sur une feuille de suie d'après la procédure décrite au chapitre 2. La taille de la cellule λ est une mesure de la sensibilité à la détonation pour un mélange donné et permet une comparaison avec d'autres mélanges. Les mesures de la taille de la cellule ont été prises dans des conditions de détonation stable pour toutes les conditions étudiées. Malheureusement, la taille de la cellule et la résolution des mesures de la taille de la cellule dans des conditions de dilution d'azote étaient peu concluantes en raison de leur grande taille. Seules quelques cellules ont pu être mesurées, mais pas suffisamment pour tirer des conclusions statistiquement significatives. Par conséquent, les résultats présentés ici concernent seulement les expériences correspondant aux mélanges carburant/dioxygène. La Figure IV - 5 montre le changement de largeur de la cellule mesurée induit par l'ajout d'IPN dans les mélanges carburants. La Figure IV-5b montre une diminution marquée de la largeur moyenne de la taille de la cellule lorsque la pression initiale augmente de 6,7 à 13,3 kPa. L'ajout de IPN dans le mélange induit une légère diminution sur la largeur de la cellule. Le Tableau IV - 1 résume la largeur moyenne de la cellule et l'écart-type pour les quatre conditions étudiées.

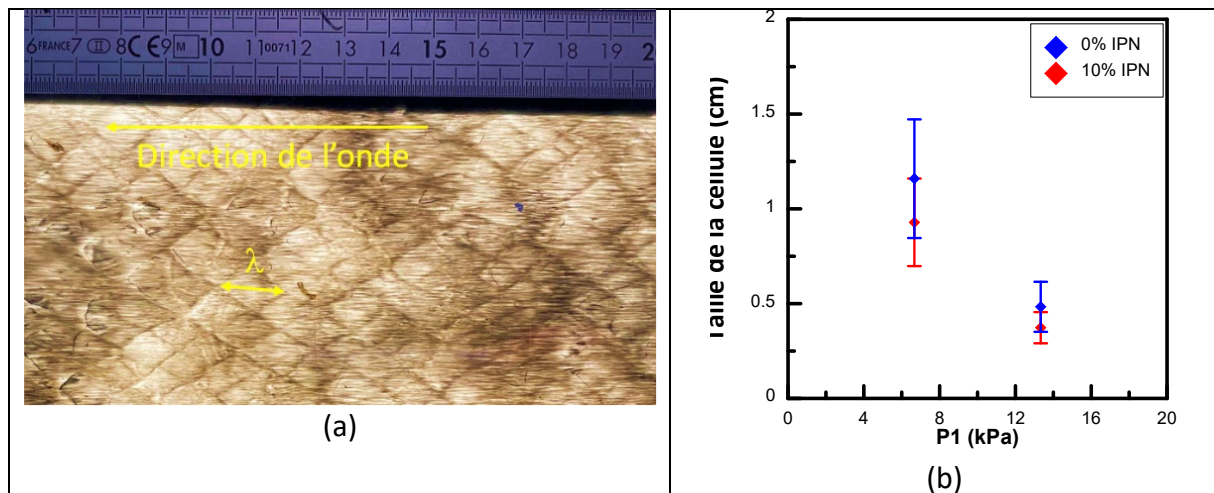


Figure IV - 5 : (a) Exemple d'une feuille de suie et (b) mesures de la largeur des cellules en fonction de la pression P_1 dans le cas du mélange C_3H_8/O_2 sans (symboles bleus) et avec (symboles rouges) IPN.

La Figure IV - 6 présente la comparaison de l'évolution de la taille de la cellule en fonction des deux pressions initiales (6,7 et 13,3 kPa) étudiées avec la littérature pour le mélange C_3H_8/O_2 . Ainsi, les tailles de cellules, mesurées dans ce travail, sont en bon accord avec la littérature, illustration dans la Figure IV-6 (Knystautas, Lee, et Guirao 1982) (Kaneshige 1999).

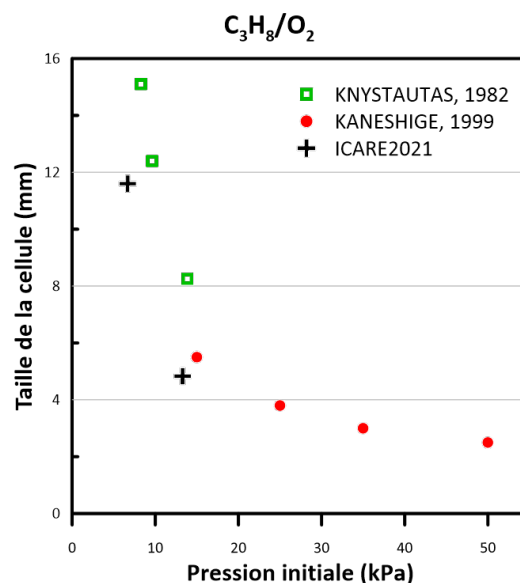


Figure IV - 6 : Comparaison avec la littérature de l'évolution de la taille de la cellule (en mm) en fonction de la pression initiale (en kPa) pour le mélange C_3H_8/O_2 . Les résultats obtenus à ICARE sont indiqués par une croix noire, les résultats de Knystautas (Knystautas, Lee, et Guirao 1982) par des carrés verts et ceux de Kaneshige (Kaneshige 1999) par des points rouges.

Dans le cas du mélange avec une dilution de N_2 , on observe un changement dans la structure de la taille des cellules qui est intéressant, sur la Figure IV - 7. Les cellules de détonation s'agrandissent légèrement à mesure que l'onde se forme en raison du fait que l'onde de détonation initialement supprimée commence à se détendre jusqu'à la condition D_{CJ} .

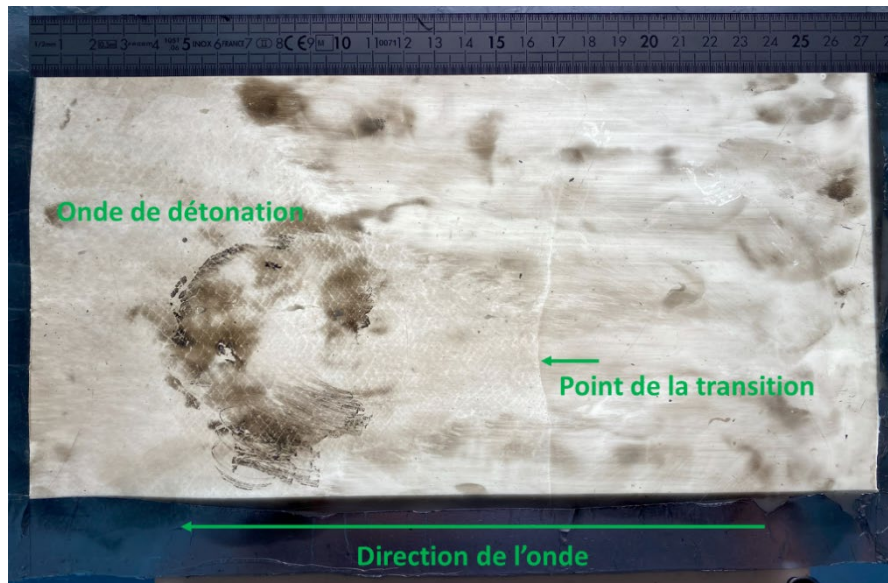


Figure IV - 7 : Exemple de la transition vers la détonation capturée par la feuille de suie montrant le point de transition et l'onde de détonation à l'intérieur du tube pour le mélange $C_3H_8/O_2/N_2$.

3 Résultats TCD obtenus dans le cas de mélanges propène-dioxygène-diazote

La Figure IV-8 représente la variation de la vitesse de l'onde en fonction de la pression du gaz moteur P4 et en fonction du rapport $\frac{P_2 - P_1}{P_1}$ pour un mélange stœchiométrique de C_3H_6/O_2 avec une dilution au diazote de 0 %, 43 % et 62% . Les points bleus correspondent à la vitesse mesurée tandis que les droites en pointillés rouges et oranges correspondent à la vitesse de Chapman Jouguet, D_{CJ} .

D'après la Figure IV-8, un régime correspondant à l'accélération et à l'amplification de l'onde de choc pour transiter vers une détonation est observé. On peut noter que l'augmentation de la dilution rend difficile la transition d'une onde de choc vers une détonation. Cela signifie que la transition nécessite plus d'énergie quand la dilution au diazote est grande.

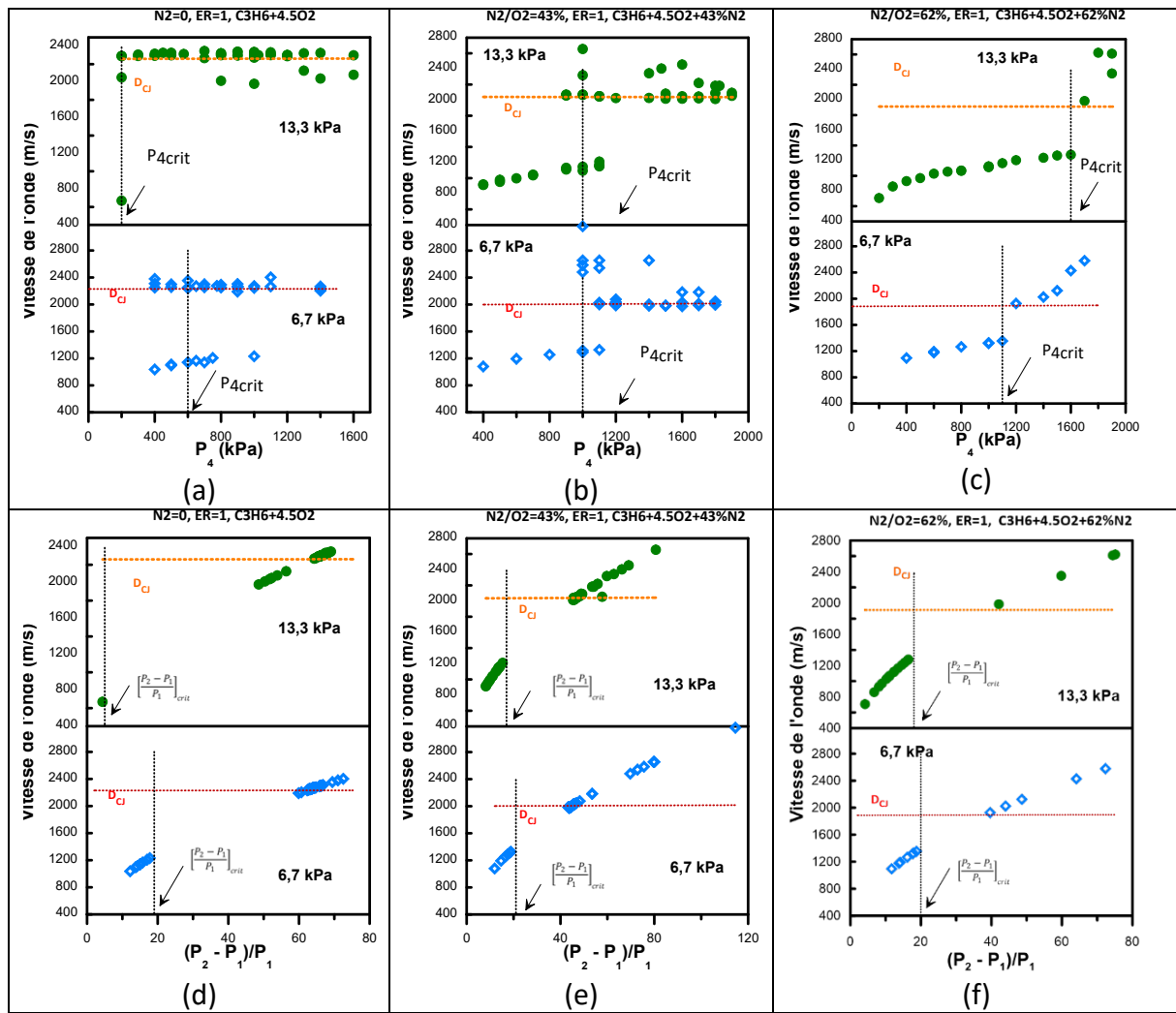


Figure IV - 8 : Vitesse de l'onde pour une pression initiale de 13,3 kPa (figure du haut, symboles verts) et 6,7 kPa (figure du bas, symboles bleus) en fonction (a,b,c) de la pression P_4 du gaz moteur et (d,e,f) du rapport $\frac{P_2 - P_1}{P_1}$. Symboles : vitesse de l'onde expérimentale (V_{exp}) ; droites en pointillé : vitesse théorique de la détonation de Chapman-Jouguet (D_{CJ}). Les valeurs critiques (P_{4crit} ou $\frac{P_2 - P_1}{P_1}crit$) sont indiquées par une droite verticale.

La Figure IV-9 présente la taille de la cellule de détonation du mélange $C_3H_6-O_2$ pour deux pressions initiales. Comme le propane, l'augmentation de la pression initiale induit à une diminution du largeur de la cellule. En revanche, nos tailles de cellule sont presque le double de celles de la littérature.

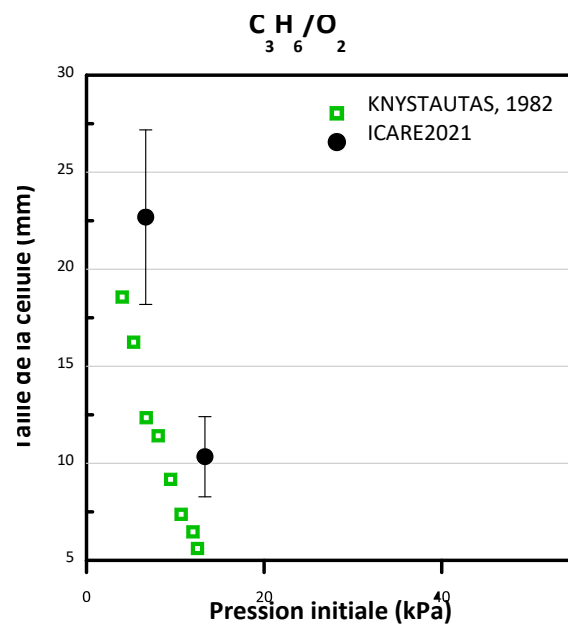


Figure IV - 9: Taille de la cellule de $\text{C}_3\text{H}_6+4,5\text{O}_2$ avec la comparaison de la littérature à 6,7 et 13,3 kPa. Les résultats obtenus à ICARE sont indiqués par des points noirs, les résultats de Knystautas (Knystautas, Lee, et Guirao 1982) par des carrés verts.

Conclusion

Cette étude a permis de déterminer, pour quatre mélanges stœchiométriques du propane et du mélange propane/IPN, les conditions nécessaires pour initier une détonation derrière une onde de choc à deux pressions initiales P_1 (6,7 kPa et 13,3 kPa).

Les résultats présentés indiquent que l'IPN, ajouté à une concentration de 10% dans le carburant, augmente la sensibilité à la détonation. Son ajout a entraîné une diminution du P_{2crit} et du T_{2crit} pour initier la détonation, ainsi qu'une diminution de la taille moyenne mesurée des cellules de détonation.

Pour le propène, on constate qu'une forte augmentation de la dilution à l'azote rend la transition d'une onde de choc vers une détonation stable (TCD) difficile.

4 Conclusions et Perspectives

Les recherches menées dans le cadre de cette thèse contribuent à l'avancement et à l'amélioration des performances des moteurs à ondes de détonation en particulier le PDE (Pulsed Detonation Engine). Les carburants principalement utilisés dans ce système sont des hydrocarbures lourds tels que le kérosène et le JP-10. Compte tenu de l'épuisement et de l'impact environnemental des ressources fossiles, il est actuellement impératif de trouver des alternatives durables pour les systèmes de propulsion à détonation et n'ayant pas un impact néfaste sur l'environnement. La recherche bibliographique montre que le propane (C_3H_8), qui possède des propriétés de détonation similaires à celles du JP-10, est une des alternatives aux carburants lourds. La composition simple du propane et son faible potentiel de formation d'ozone contribuent à atténuer les problèmes de réchauffement climatique tout en limitant les dommages environnementaux. Néanmoins, les propriétés de détonation du propane ne sont pas favorables et il est indispensable d'ajouter un additif en vue d'accélérer la vitesse de libération de l'énergie afin de faciliter une transition rapide depuis un régime de déflagration vers celui de la détonation. Ainsi, l'intégration d'un additif améliorant la combustion du propane vise à augmenter l'efficacité des systèmes de propulsion à détonation. L'isopropyle de nitrate (IPN) a été choisi en tant qu'additif pour ses excellentes propriétés en tant que carburant à haute performance, notamment sa sensibilité élevée aux explosions et son large domaine d'explosion (de 2 à 100 %) (Liu et Wang 2017).

Dans un premier temps, une étude bibliographique a révélé un manque de données expérimentales dans la littérature sur les vitesses de flamme laminaire pour les mélanges propane+IPN et IPN dans l'air. Cependant, de nombreux travaux sur le propane nous ont permis de valider notre étude préliminaire. Par conséquent, les travaux entrepris dans le cadre de cette thèse ont permis d'enrichir la base de données expérimentales et numériques sur la combustion de ces mélanges. Ces données incluent les paramètres fondamentaux de la combustion tels que la vitesse de flamme laminaire, l'énergie d'activation, le nombre Zel'dovich et l'épaisseur de la flamme. Ces études ont été réalisées dans une bombe sphérique de 56 Litres (avec un diamètre 476 mm) et ont été simulées en utilisant le mécanisme cinétique élaboré par le Professeur Goldsmith (Brown University). Pour le propane, l'étude a été effectuée dans une large gamme de rapport d'équivalence ($0,6 < ER < 1,7$) en prenant en compte deux températures initiales (300 et 373K), avec une pression

initiale de 100 kPa. Pour l'IPN, les rapports d'équivalence ont été variés entre 0,6 et 2,1, pour deux pressions initiales (50 et 100 kPa) à une température initiale de 373K. Pour le mélange propane+IPN, le domaine des rapports d'équivalence s'étendait de 0,7 à 1,7 pour une pression de 100 kPa et une température de 373K.

Au cours de cette thèse, une collaboration a été établie avec le Professeur Goldsmith de Brown University. Les résultats expérimentaux de la vitesse de flamme laminaire obtenus dans le cadre de cette thèse ont permis la validation du mécanisme réactionnel décrivant la combustion de mélanges propane et d'isopropyle de nitrate développé par le Professeur Goldsmith, publié dans un article international avec comité de lecture (Fuller et al. 2022).

La transition vers la détonation des mêmes mélanges a également été étudiée dans le cadre de cette thèse. Pour ce faire, deux configurations de tubes à choc de 78 mm de diamètre et de 5 m de longueur ont été utilisées : l'une conçue pour la transition choc-détonation (TCD) et l'autre pour la transition déflagration-détonation (TDD) équipée d'une spirale. L'objectif de cette partie était de caractériser les propriétés de détonation de ces mélanges et d'évaluer l'impact de l'ajout de l'IPN au propane. La sensibilité à la détonation a été évaluée à l'aide de la méthode de la taille de la cellule de détonation, qui consiste à insérer une feuille couverte de suie dans le tube à choc. Les conditions critiques des paramètres de von Neumann ont également été établies.

Il est important de noter l'aspect novateur de ce travail de thèse puisque les résultats portant sur la détermination expérimentale et numérique des vitesses de flamme laminaire d'isopropyle de nitrate et de ses paramètres fondamentaux de détonation n'avaient jamais été rapportés dans la littérature. Un des résultats majeurs obtenus dans le cadre de ce travail a été de montrer que l'addition de 10% d'isopropyle de nitrate au propane améliore et élargit la réactivité globale par rapport au carburant pur, notamment aux limites basse et haute des rapports d'équivalence.

Les mesures de la vitesse de détonation, de la taille des cellules et des conditions critiques fournissent des données inédites sur l'ajout d'isopropyle de nitrate et sur rôle de promoteur à la détonation. Il a été montré que l'ajout de 10% d'IPN a entraîné une diminution des conditions critiques nécessaires à la détonation des mélanges propane-oxygène tant avec que sans dilution au diazote pour les deux conditions de pression : $P = 6,7$ kPa et $13,3$ kPa. Ces travaux novateurs ont été présentés en 2022 lors de la conférence internationale, ICDERS.

Les résultats obtenus dans le cadre de ce travail suggèrent que l'IPN présente un fort potentiel en tant que sensibilisateur de détonation pour des applications pertinentes aux moteurs à détonation pulsée et rotative.

Une étude complémentaire a été réalisée avec le propène (C_3H_6). Le choix de ce carburant a été effectué en raison de sa similarité avec le propane en termes de propriétés physiques (masse molaire et coefficient adiabatique, i.e. le rapport des capacités calorifiques à pression et volume constant, proches) mais de sa réactivité différente (alcane/alcène et présence d'une double liaison). En outre, cette étude a été motivée par le constat du manque de données disponibles dans la littérature. Tout comme pour le propane, nous avons déterminé les paramètres fondamentaux de la combustion du propène, à deux températures initiales différentes (298 et 373 K), pour une pression de 100 kPa et pour un rapport d'équivalence compris entre 0,7 et 1,6. Dans le cas du propène, nous avons utilisé le mécanisme cinétique de l'Université de Californie à San Diego datant de 2016 pour simuler les vitesses de flammes laminaires. Nos résultats expérimentaux ont montré une bonne concordance avec la simulation, à l'exception d'une sous-estimation de la vitesse de flamme pour les rapports d'équivalence compris entre 1 et 1,3. Nous avons également mené une étude sur la transition vers la détonation afin de déterminer la taille de la cellule.

Plusieurs perspectives à ce travail peuvent être envisagées.

Tout d'abord, sur l'aspect cinétique, la validation du mécanisme réactionnel élaboré en collaboration avec le Professeur Goldsmith pourrait être étendue à des paramètres détaillés de profils d'espèces. En effet, ce mécanisme a été validé sur des paramètres globaux : vitesses de flammes et délais d'auto-inflammation, mais il serait nécessaire de fournir des paramètres expérimentaux de profils d'espèces qui pourraient être mesurés derrière une onde de choc réfléchie. Ces profils pourraient être obtenus dans le SPST (Single-Pulse Shock Tube) dans des conditions de forte dilution en Argon (99,9%) aux conditions de pression et de température d'intérêt.

Puis, il serait intéressant d'évaluer les pertes radiatives des flammes d'IPN. La mesure des pertes radiatives pourraient être effectuées dans la bombe sphérique en utilisant le détecteur infrarouge FAIRS développé et testé au laboratoire dont les premières études ont été publiées dans (Idir et al. 2022). Cela permettrait d'obtenir des profils de température réels

qui pourraient être implémentés dans les simulations afin d'affiner les prédictions des vitesses de flammes.

Ainsi, le développement de ce mécanisme réactionnel permettrait d'envisager la modélisation des paramètres de déflagration et de détonation de mélange propane/IPN et d'envisager la simulation des tailles de cellules de détonation afin de caractériser la sensibilité à la détonation et la longueur de la transition à détonation.

Pour compléter les résultats obtenus sur la transition onde de choc-détonation (TCD), des expériences seraient nécessaires dans le but de caractériser l'impact de l'IPN sur le propane ainsi que l'impact de la dilution au diazote sur la transition déflagration-détonation (TDD). Pour ce faire, des expériences pourraient être réalisées dans notre tube à choc équipé du système Schlieren auquel une section supplémentaire a été ajoutée afin d'étudier l'interaction entre une onde de déflagration et des ondes de choc.

Les données sur l'impact de l'ajout d'IPN obtenues avec le propane pourraient être comparées avec celles du propène, carburant non-NTC (coefficient de température négatif), pour déterminer s'il existe des différences significatives. Dans ce cas, il serait nécessaire de poursuivre les campagnes expérimentales déjà réalisées sur la transition déflagration-détonation (TDD) de l'IPN qui représente un intérêt majeur pour l'industrie spatial.

Enfin, il serait important de déterminer les conditions de pressions et de températures d'auto-inflammation de l'IPN, puisque l'IPN peut être utilisé en tant que monergol, à l'instar de l'hydrazine. En effet, le remplacement de l'hydrazine, en raison de sa toxicité, devient une urgence du secteur spatial.

Références bibliographiques

Adamson Jr., T.C., et G.R. Olsson. «PERFORMANCE ANALYSIS OF A ROTATING DETONATION WAVE ROCKET ENGINE» *Astronautica Acta* 13 (1967): 405-415.

Addabbo, R., J.K. Bechtold, et M. Matalon. 2002. « WRINKLING OF SPHERICALLY EXPANDING FLAMES ». *Proceedings of the Combustion Institute* 29 (2): 1527-35.

Adelman, H., J.-L. Cambier, et G.P. Menees. *Journal of Propulsion and Power* 6 (1990): 315-323.

Akbar, R., P. Thibault, P. Harris, L. Lussier, F. Zhang, S. Murray, et K. Gerrard. 2000. « DETONATION PROPERTIES OF UNSENSITIZED AND SENSITIZED JP-10 AND JET-A FUELS IN AIR FOR PULSE DETONATION ENGINES ». In *36th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference and Exhibit*. Las Vegas, NV, U.S.A.: American Institute of Aeronautics and Astronautics.

Ambekar, A., A. Chowdhury, S. Challa, et D. Radhakrishna. 2014. « DROPLET COMBUSTION STUDIES OF HYDROCARBON-MONOPROPELLANT BLENDS ». *Fuel* 115 (janvier): 697-705.

Ambekar, A., S. Sreedhara, et A. Chowdhury. 2015. « BURN RATE CHARACTERIZATION OF ISO-PROPYL NITRATE – A NEGLECTED MONOPROPELLANT ». *Combustion and Flame* 162 (3): 836-45.

Aung, K.T., M.I. Hassan, et G.M. Faeth. 1997. « FLAME STRETCH INTERACTIONS OF LAMINAR PREMIXED HYDROGEN/AIR FLAMES AT NORMAL TEMPERATURE AND PRESSURE ». *Combustion and Flame* 109 (1-2): 1-24.

Austin, J.M., et J.E. Shepherd. 2003. « DETONATIONS IN HYDROCARBON FUEL BLENDS ». *Combustion and Flame*.

Bach, E., C.O. Paschereit., P. Stathopoulos., et M.D. Bohon. 2021. « AN EMPIRICAL MODEL FOR STAGNATION PRESSURE GAIN IN ROTATING DETONATION COMBUSTORS ». *Proceedings of the Combustion Institute* 38 (3): 3807-14.

Bosschaart, K.J., et L.P.H. De Goey. 2004. « THE LAMINAR BURNING VELOCITY OF FLAMES PROPAGATING IN MIXTURES OF HYDROCARBONS AND AIR MEASURED WITH THE HEAT FLUX METHOD ». *Combustion and Flame* 136 (3): 261-69.

Bull, D.C., J.E. Elsworth, et G. Hooper. 1978. « INITIATION OF SPHERICAL DETONATION IN HYDROCARBON/AIR MIXTURES ». *Acta Astronautica* 5 (11): 997-1008.

Burke, S.M., U. Burke., R. Mc Donagh., O. Mathieu., I. Osorio, C. Keesee, A. Morones, et al. 2015. « AN EXPERIMENTAL AND MODELING STUDY OF PROPENE OXIDATION. PART 2: IGNITION DELAY TIME AND FLAME SPEED MEASUREMENTS ». *Combustion and Flame* 162 (2): 296-314.

Burke, S.M., W. Metcalfe., O. Herbinet., F. Battin-Leclerc., F.M. Haas., J. Santner., F.L. Dryer., et H.J. Curran. 2014. « AN EXPERIMENTAL AND MODELING STUDY OF PROPENE OXIDATION. PART 1: SPECIATION MEASUREMENTS IN JET-STIRRED AND FLOW REACTORS ». *Combustion and Flame* 161 (11): 2765-84.

Burr, J.R., et K.H. Yu. 2016. « DETONATION REIGNITION WITHIN A ROTATING DETONATION ENGINE ». In 54th AIAA Aerospace Sciences Meeting. San Diego, California, USA: American Institute of Aeronautics and Astronautics.

Bussing, T., et G. Pappas. 1994. « AN INTRODUCTION TO PULSE DETONATION ENGINES ». In 32nd Aerospace Sciences Meeting and Exhibit. Reno, NV,U.S.A.: American Institute of Aeronautics and Astronautics.

Bruckner, A.P., et A. Hertzberg. «RAM ACCELERATOR DIRECT LAUNCH SYSTEM FOR SPACE CARGO» International Astronautical Federation. 1987.

Chaumeix, N, B Imbert, L. Catoire, et C, E. Paillard. «THE ONSET OF DETONATION BEHIND SHOCK» *Combustion Science and Technology*, 2014: 607-620.

Chen, Z. 2010. « EFFECTS OF RADIATION AND COMPRESSION ON PROPAGATING SPHERICAL FLAMES OF METHANE/AIR MIXTURES NEAR THE LEAN FLAMMABILITY LIMIT ». *Combustion and Flame* 157 (12): 2267-76.

Chen, Z. 2011a. « ON THE EXTRACTION OF LAMINAR FLAME SPEED AND MARKSTEIN LENGTH FROM OUTWARDLY PROPAGATING SPHERICAL FLAMES ». *Combustion and Flame* 158 (2): 291-300.

Ciccarelli, G., et S. Dorofeev. 2008. « FLAME ACCELERATION AND TRANSITION TO DETONATION IN DUCTS ». Progress in Energy and Combustion Science 34 (4): 499-550.

Ciezki, H.K., et G. Adomeit. 1993. « SHOCK-TUBE INVESTIGATION OF SELF-IGNITION OF N-HEPTANE-AIR MIXTURES UNDER ENGINE RELEVANT CONDITIONS ». Combustion and Flame 93 (4): 421-33.

Clavin, P. 1985. « DYNAMIC BEHAVIOR OF PREMIXED FLAME FRONTS IN LAMINAR AND TURBULENT FLOWS ». Progress in Energy and Combustion Science 11 (1): 1-59.

Cooper, M., S. Jackson., J. Austin., E. Wintenberger., et J. E. Shepherd. 2002. « DIRECT EXPERIMENTAL IMPULSE MEASUREMENTS FOR DETONATIONS AND DEFLAGRATIONS ». Journal of Propulsion and Power 18 (5): 1033-41.

COSILAB, The Combustion Simulation Laboratory, Rotexo GmbH & Co. KG, Haan, Germany, 2009 Version 4.3.2 <http://www.SoftPredict.com>.

Coudoro, K. 2012. « ETUDE EXPERIMENTALE ET MODELISATION DE LA PROPAGATION DE FLAMME EN MILIEU CONFINE OU SEMI-CONFINE ». Thèse, Orléans: UNIVERSITÉ D'ORLÉANS.

Dabora, E.K. «STATUS OF GASEOUS DETONATION WAVES AND THEIR ROLE IN PROPULSION» Fall Technical Meeting of the Eastern States Section of the Combustion Institute, 1994: 11-18.

Davis, S G., et C.K Law. 1999. « PROPENE PYROLYSIS AND OXIDATION KINETICS IN A FLOW REACTOR AND LAMINAR FLAMES ».

Dean, T. 2003. « RECENT DEVELOPMENTS IN APPROACHES TO PULSED DETONATION PROPULSION (INVITED) ». In 39th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference and Exhibit. Huntsville, Alabama: American Institute of Aeronautics and Astronautics.

Dean, A.J., A. Rasheed., V. Tangirala., et P.F. Pinard. 2005. « OPERATION AND NOISE TRANSMISSION OF AN AXIAL TURBINE DRIVEN BY A PULSE DETONATION COMBUSTOR ». In Volume 6: Turbo Expo 2005, Parts A and B, 1275-84. Reno, Nevada, USA: ASMEDC.

Denisov, Y.N., et Y.K Troshin. «ON THE MECHANISM OF DETONATIVE COMBUSTION» Symposium (International) on Combustion, 1961: 600-610.

Dirrenberger, P. 2014. « ETUDE EXPERIMENTALE ET THEORIQUE DES VITESSES DE FLAMMES LAMINAIRES D'HYDROCARBURES ».

Dorofeev, S.B., V.P. Sidorov, M.S. Kuznetsov, I.D. Matsukov, et V.I. Alekseev. 2000. « EFFECT OF SCALE ON THE ONSET OF DETONATIONS ». Shock Waves 10 (2): 137-49.

Dugger, G.L., et S. HeimeL. 1952. « FLAME SPEEDS OF METHANE-AIR, PROPANE-AIR, AND ETHYLENE-AIR MIXTURES AT LOW INITIALTEMPERATURES ».

Dunlap, R., R. L. Brehm, et J. A. Nicholls. 1958. « A PRELIMINARY STUDY OF THE APPLICATION OF STEADY-STATE DETONATIVE COMBUSTION TO A REACTION ENGINE ». Journal of Jet Propulsion 28 (7): 451-56.

Egolfopoulos, F.N., D.L. Zhu, et C.K. Law. 1991. « EXPERIMENTAL AND NUMERICAL DETERMINATION OF LAMINAR FLAME SPEEDS: MIXTURES OF C2-HYDROCARBONS WITH OXYGEN AND NITROGEN ». Symposium (International) on Combustion 23 (1): 471-78.

Eidelman, S., et W. Grossmann. 1992. « PULSED DETONATION ENGINE EXPERIMENTAL AND THEORETICAL REVIEW ». In 28th Joint Propulsion Conference and Exhibit. Nashville,TN,U.S.A.: American Institute of Aeronautics and Astronautics.

Eidelman, S., W. Grossmann, et I. Lottati. 1990. « AIR-BREATHING PULSED DETONATION ENGINE CONCEPT - A NUMERICAL STUDY ». In 26th Joint Propulsion Conference. Orlando,FL,U.S.A.: American Institute of Aeronautics and Astronautics.

Eidelman, S., W. Grossmann, et I. Lottati. 1991. « REVIEW OF PROPULSION APPLICATIONS AND NUMERICAL SIMULATIONS OF THE PULSED DETONATION ENGINE CONCEPT ». Journal of Propulsion and Power 7 (6): 857-65.

Eschenbach, R.C., et J.T. Agnew. 1958. « USE OF THE CONSTANT-VOLUME BOMB TECHNIQUE FOR MEASURING BURNING VELOCITY ». Combustion and Flame 2 (3): 273-85.

Farrell, J.T., R.J. Johnston, et Androulakis I.P. «MOLECULAR STRUCTURE EFFECTS ON LAMINAR BURNING VELOCITIES AT ELEVATED TEMPERATURE AND PRESSURE» Society of Automotive Engineers, 2004.

Frolov, S. M., V. S. Aksenov, V. S. Ivanov, S. N. Medvedev, I. O. Shamshin, N. N. Yakovlev, et I. I. Kostenko. 2018. « ROCKET ENGINE WITH CONTINUOUS DETONATION COMBUSTION OF THE NATURAL GAS–OXYGEN PROPELLANT SYSTEM ». Doklady Physical Chemistry 478 (2): 31-34.

Fuller, M.E., A. Mousse-Rayaleh, N. Chaumeix, et C. F. Goldsmith. 2022. « LAMINAR FLAME SPEEDS AND IGNITION DELAY TIMES FOR ISOPROPYL NITRATE AND PROPANE BLENDS ». *Combustion and Flame* 242 (août): 112187.

Gibbs, G. J., et H. F. Calcote. 1959. « EFFECT OF MOLECULAR STRUCTURE ON BURNING VELOCITY » *Journal of Chemical & Engineering Data* 4 (3): 226-37.

Gifford, M.J., W.G. Proud, et J.E. Field. 2002. « DEVELOPMENT OF A METHOD FOR QUANTIFICATION OF HOT-SPOTS ». *Thermochimica Acta* 384 (1-2): 285-90.

Glassman, I. 1997« *Combustion*». Academic Press. San Diego California.

Gordon, S, et BI Mac Bride. «COMPUTER PROGRAM FOR CALCULATION OF COMPLEX CHEMICAL EQUILIBRIUM CONDITIONS, ROCKET PERFORMANCE, INCIDENT AND REFLECTED SHOCKS AND CHAPMAN-JOUGUET» 1971.

Goulier, J. 2015. « COMPORTEMENTS AUX LIMITES DE FLAMMES DE PREMELANGE HYDROGENE/AIR. ÉTUDE DE LA TRANSITION FLAMME LAMINAIRE-FLAMME TURBULENTE ». Thèse, Orléans : UNIVERSITÉ D'ORLÉANS.

Grosseuvres, R. 2018. « ANALYSE DE PROPAGATION DE FLAMMES HYDROGENE-AIR-VAPEUR D'EAU EN MILIEU CONFINE ». Thèse, Orléans : Université d'Orléans.

Grossmann, W. 1992. « PULSED DETONATION ENGINE EXPERIMENTAL AND THEORETICAL REVIEW ». In 28th Joint Propulsion Conference and Exhibit. Nashville,TN,U.S.A.: American Institute of Aeronautics and Astronautics.

Gülder, Ö. L. 1982. « LAMINAR BURNING VELOCITIES OF METHANOL, ETHANOL AND ISOCTANE-AIR MIXTURES ». *Symposium (International) on Combustion* 19 (1): 275-81.

Hassan, M. I., K. T. Aung, O. C. Kwon, et G. M. Faeth. 1998. « PROPERTIES OF LAMINAR PREMIXED HYDROCARBON/AIR FLAMES AT VARIOUS PRESSURES ». *Journal of Propulsion and Power* 14 (4): 479-88.

He, X., et A.R. Karagozian. 2003. « NUMERICAL SIMULATION OF PULSE DETONATION ENGINE PHENOMENA ».

Hedlund, F. H., M. F. Nielsen., S. H. Mikkelsen., et E. K. Kragh. 2014. « VIOLENT EXPLOSION AFTER INADVERTENT MIXING OF NITRIC ACID AND ISOPROPANOL – REVIEW 15YEARS LATER

FINDS BASIC ACCIDENT DATA CORRUPTED, NO EVIDENCE OF BROAD LEARNING ». *Safety Science* 70 (décembre): 255-61.

Hertzberg, A., A. P. Bruckner, et D. W. Bogdanoff. 1988. « RAM ACCELERATOR - A NEW CHEMICAL METHOD FOR ACCELERATING PROJECTILES TO ULTRAHIGH VELOCITIES ». *AIAA Journal* 26 (2): 195-203.

Hertzberg, A., A.P. Bruckner, et D.W. Bogdanoff. 1986. « APPARATUS AND METHOD FOR THE ACCELERATION OF PROJECTILES TO HYPERVELOCITIES » Google patents.

Higgins, A. J. 2006. « RAM ACCELERATORS: OUTSTANDING ISSUES AND NEW DIRECTIONS ». *Journal of Propulsion and Power* 22 (6): 1170-87.

Hinkey, J., T. Bussing, et L. Kaye. 1995a. « SHOCK TUBE EXPERIMENTS FOR THE DEVELOPMENT OF A HYDROGEN-FUELED PULSE DETONATION ENGINE ». In 31st Joint Propulsion Conference and Exhibit. San Diego, CA, U.S.A.: American Institute of Aeronautics and Astronautics.

Hoffmann, N. 1940. « REACTION PROPULSION BY INTERMITTENT DETONATIVE COMBUSTION » Ministry of Supply Volkenrode Translation.

Hoke, J., R. Bradley, et F. Schauer. 2005. « IMPACT OF DDT MECHANISM, COMBUSTION WAVE SPEED, TEMPERATURE, AND CHARGE QUALITY ON PULSED-DETONATION-ENGINE PERFORMANCE ». In 43rd AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit. Reno, Nevada: American Institute of Aeronautics and Astronautics.

<https://fiji.sc/>

Hu, E.J., Z.H. Huang, X. Jiang, Q.Q. Li, et X.Y. Zhang. 2013. « KINETIC STUDY ON LAMINAR BURNING VELOCITIES AND IGNITION DELAY TIMES OF C1-C4 ALKANES » *Journal of Engineering Thermophysics*, : 558-562.

Huzayyin, A.S., H.A. Moneib, M.S. Shehatta, et A.M.A. Attia. 2008. « LAMINAR BURNING VELOCITY AND EXPLOSION INDEX OF LPG-AIR AND PROPANE-AIR MIXTURES ». *Fuel* 87 (1): 39-57.

Idir, M., A. Mousse-Rayaleh, D. De Sousa Meneses, N. Semmar, et N. Chaumeix. 2022. « ABSOLUTE AND REAL TIME EXPERIMENTAL RADIATIVE LOSS MEASUREMENTS OF SPHERICAL EXPANDING FREE FLAMES: FAIRS (FAST ABSOLUTE INFRARED SENSOR)—AN INNOVATIVE TECHNIQUE ». *Review of Scientific Instruments* 93 (9): 095103.

Imbert, B. 2004. « ETUDE CINETIQUE DE L'INFLAMMATION DE MELANGES A BASE D'HEPTANE DANS UNE ONDE DE CHOC, EN VUE D'APPLICATIONS A LA PROPULSION PAR ONDE DE DETONATION ». Thèse, Orléans : l'Université d'Orléans.

Intergovernmental Panel on Climate Change, et Ottmar Edenhofer, éd. 2014. Climate Change 2014: MITIGATION OF CLIMATE CHANGE: WORKING GROUP III CONTRIBUTION TO THE FIFTH ASSESSMENT REPORT OF THE INTERGOVERNMENTAL PANEL ON CLIMATE CHANGE. New York, NY: Cambridge University Press.

Jayachandran, J., R. Zhao, et F. N. Egolfopoulos. 2014. « DETERMINATION OF LAMINAR FLAME SPEEDS USING STAGNATION AND SPHERICALLY EXPANDING FLAMES: MOLECULAR TRANSPORT AND RADIATION EFFECTS ». Combustion and Flame 161 (9): 2305-16.

Jeung, I.-S., J.-Y. Choi, et Y. Yoon. AIAA J 36 (1998): 1029-1038.

Jomaas, G., X.L. Zheng, D.L. Zhu, et C.K. Law. 2005. « EXPERIMENTAL DETERMINATION OF COUNTERFLOW IGNITION TEMPERATURES AND LAMINAR FLAME SPEEDS OF C2-C3 HYDROCARBONS AT ATMOSPHERIC AND ELEVATED PRESSURES ». Proceedings of the Combustion Institute 30 (1): 193-200.

Kailasanath, K. 2003. « RECENT DEVELOPMENTS IN THE RESEARCH ON PULSE DETONATION ENGINES ». AIAA Journal 41 (2): 145-59.

Kaneshige, M.J. 1999 « GASEOUS DETONATION INITIATION AND STABILIZATION BY HYPERVELOCITY PROJECTILES ». Thèse, California Institute of Technology.

Kawakami, T., S. Okajima, et K. Inuma. 1989. « MEASUREMENT OF SLOW BURNING VELOCITY BY ZERO-GRAVITY METHOD ». Symposium (International) on Combustion 22 (1): 1609-13.

Kelley, A.P., et C.K. Law. 2009. « NONLINEAR EFFECTS IN THE EXTRACTION OF LAMINAR FLAME SPEEDS FROM EXPANDING SPHERICAL FLAMES ». Combustion and Flame 156 (9): 1844-51.

Kiyanda, C. B., V. Tanguay, A. J. Higgins, et J. H. S. Lee. 2002. « EFFECT OF TRANSIENT GASDYNAMIC PROCESSES ON THE IMPULSE OF PULSE DETONATION ENGINES ». Journal of Propulsion and Power 18 (5): 1124-26.

Knystautas, R., J.H. Lee, et C.M. Guirao. 1982. « THE CRITICAL TUBE DIAMETER FOR DETONATION FAILURE IN HYDROCARBON-AIR MIXTURES ». Combustion and Flame 48 (janvier): 63-83.

Knystautas, R., J.H. Lee, I. Moen, et H.Gg. Wagner. 1979. « DIRECT INITIATION OF SPHERICAL DETONATION BY A HOT TURBULENT GAS JET ». Symposium (International) on Combustion 17 (1): 1235-45.

Kuehl, D.K. 1961. « LAMINAR-BURNING VELOCITIES OF PROPANE-AIR MIXTURES ». Symposium (International) on Combustion 8 (1): 510-21.

Kuznetsov, M.S., I. D Matsukov, V. I. Alekseev, et S. B. Dorofeev. 1999. « PHOTOGRAPHIC STUDY OF UNSTABLE TURBULENT FLAMES IN OBSTRUCTED CHANNELS ».

Lamoureux, N., N. Djebaïli-Chaumeix, et C.-E Paillard. 2003. « LAMINAR FLAME VELOCITY DETERMINATION FOR H₂-AIR-HE-CO₂ MIXTURES USING THE SPHERICAL BOMB METHOD ». Experimental Thermal and Fluid Science 27 (4): 385-93.

Lee, J.H.S., R. Knystautas, et A. Freiman. 1984. « HIGH SPEED TURBULENT DEFLAGRATIONS AND TRANSITION TO DETONATION IN H₂/AIR MIXTURES ». Combustion and Flame 56 (2): 227-39.

Lee, S.Y., J. Watts., S. Saretto., S. Pal., C. Conrad, R. Woodward, et S. Robert. 2004. « DEFLAGRATION TO DETONATION TRANSITION PROCESSES BY TURBULENCE-GENERATING OBSTACLES IN PULSE DETONATION ENGINES ». Journal of Propulsion and Power 20 (6): 1026-36.

Lewis, B., et G. Von Elbe. 1934. « DETERMINATION OF THE SPEED OF FLAMES AND THE TEMPERATURE DISTRIBUTION IN A SPHERICAL BOMB FROM TIME-PRESSURE EXPLOSION RECORDS ». The Journal of Chemical Physics 2 (5): 283-90.

Li, C., et K. Kailasanath. 2001. «A NUMERICAL STUDY OF REACTIVE FLOWS IN PULSED DETONATION ENGINES» IAA Paper, : 2001-3933.

Liu, L., et Q. Zhang. 2019. «NUMERICAL STUDY OF CELLULAR STRUCTURE IN DETONATION OF A STOICHIOMETRIC MIXTURE OF VAPOR JP-10 IN AIR USING A QUASI-DETAILED CHEMICAL KINETIC MODEL» Aerospace Science and Technology, : 669-678.

Liu, L., et Q. Zhang. 2020. « COMPARISON OF DETONATION CHARACTERISTICS FOR TYPICAL BINARY BLENDED FUEL ». Fuel 268 (mai): 117351.

- Liu, Q., C. Bai, W. Dai, et L. Jiang. 2011. « DEFLAGRATION-TO-DETONATION TRANSITION IN ISOPROPYL NITRATE MIST/AIR MIXTURES ». *Combustion, Explosion, and Shock Waves* 47 (4): 448-56.
- Liu, S., X. Chen, N. Zhao, H. Zheng, et X. Jia. 2021. « EXPERIMENTAL STUDY ON INITIATION AND PROPAGATION BEHAVIOR OF PROPANE/OXYGEN/NITROGEN DETONATION WAVE ». *Fuel* 293 (juin): 120487.
- Liu, et Y. Wang. 2017. « A COMPARATIVE STUDY OF THE EXPLOSION CHARACTERISTICS OF IPN AND IPN/JP-10 MIXTURES IN AIR AEROSOLS ». *Propellants, Explosives, Pyrotechnics* 42 (10): 1222-32.
- Lowry, W., J. De Vries, M. Krejci., E. Petersen., Z. Serinyel., W. Metcalfe., H. Curran., et G. Bourque. 2011. « LAMINAR FLAME SPEED MEASUREMENTS AND MODELING OF PURE ALKANES AND ALKANE BLENDS AT ELEVATED PRESSURES ». *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power* 133 (9): 091501.
- Lu, F.K., J. M. Meyers, et D. R. Wilson. 2005. « EXPERIMENTAL STUDY OF A PULSE DETONATION ROCKET WITH SHCHELKIN SPIRAL ». In *Shock Waves*, édité par Z. Jiang, 825-30. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg.
- Lu, F., D. Carter, et D. Wilson. 2011. « DEVELOPMENT OF A LARGE PULSE DETONATION ENGINE DEMONSTRATOR ». In *47th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference & Exhibit*. San Diego, California: American Institute of Aeronautics and Astronautics.
- Lu, M., et W. 2005. « EXPERIMENTAL STUDY OF A PULSE DETONATION ROCKET WITH SHCHELKIN SPIRAL ». In *Shock Waves*, édité par Z. Jiang, 825-30. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg.
- Ma, L., S.T. Sanders, J.B. Jeffries, et R.K. Hanson. 2002. « MONITORING AND CONTROL OF A PULSE DETONATION ENGINE USING A DIODE-LASER FUEL CONCENTRATION AND TEMPERATURE SENSOR ». *Proceedings of the Combustion Institute* 29 (1): 161-66.
- Metghalchi, M., et J. C. Keck. 1982. « BURNING VELOCITIES OF MIXTURES OF AIR WITH METHANOL, ISOCTANE, AND INDOLINE AT HIGH PRESSURE AND TEMPERATURE ». *Combustion and Flame* 48 (janvier): 191-210.

Mével, R. 2009. « ETUDE DE MECANISMES CINETIQUES ET DES PROPRIETES EXPLOSIVES DES SYSTEMES HYDROGENE-PROTOXYDE D'AZOTE ET SILANE-PROTOXYDE D'AZOTE : APPLICATION A LA SECURITE INDUSTRIELLE ». Thèse, Orléans : UNIVERSITÉ D'ORLÉANS, 2009.

Meyers, J., F. Lu, et D. Wilson. 2003. « PERFORMANCE ENHANCEMENTS ON A PULSED DETONATION ROCKET ENGINE ». In 41st Aerospace Sciences Meeting and Exhibit. Reno, Nevada: American Institute of Aeronautics and Astronautics.

Movileanu, C., M. Mitu, V. Giurcan, D. Razus, et D. Oancea. 2020. « QUENCHING DISTANCES, MINIMUM IGNITION ENERGIES AND RELATED PROPERTIES OF PROPANE-AIR-DILUENT MIXTURES ». Fuel 274 (août): 117836.

Allen, M., P. Antwi-Agyei., F. Aragon-Durand., M. Babiker., P. Bertoldi., M. Bind., S. Brown., M. Buckeridge. et al. 2019. «Technical Summary: GLOBAL WARMING OF 1.5°C. AN IPCC SPECIAL REPORT ON THE IMPACTS OF GLOBAL WARMING OF 1.5°C ABOVE PRE-INDUSTRIAL LEVELS AND RELATED GLOBAL GREENHOUSE GAS EMISSION PATHWAYS, IN THE CONTEXT OF STRENGTHENING THE GLOBAL RESPONSE TO THE THREAT OF CLIMATE CHANGE, SUSTAINABLE DEVELOPMENT, AND EFFORTS TO ERADICATE POVERTY». Intergovernmental Panel on Climate Change.

Naples, A., J. Hoke, R. T. Battelle, M. Wagner, et F. R. Schauer. 2017. « RDE IMPLEMENTATION INTO AN OPEN-LOOP T63 GAS TURBINE ENGINE ». In 55th AIAA Aerospace Sciences Meeting. Grapevine, Texas: American Institute of Aeronautics and Astronautics.

Nativel, D., M. Pelucchi, A. Frassoldati, A. Comandini, A. Cuoci, E. Ranzi, N. Chaumeix, et T. Faravelli. 2016a. « LAMINAR FLAME SPEEDS OF PENTANOL ISOMERS: AN EXPERIMENTAL AND MODELING STUDY ». Combustion and Flame 166 (avril): 1-18.

Nativel, D., M. Pelucchi, A. Frassoldati, A. Comandini, A. Cuoci, E. Ranzi, N. Chaumeix, et T. Faravelli. 2016b. « LAMINAR FLAME SPEEDS OF PENTANOL ISOMERS: AN EXPERIMENTAL AND MODELING STUDY ». Combustion and Flame 166 (avril): 1-18.

Nativel, D., M. Pelucchi, A. Frassoldati, A. Comandini, A. Cuoci, E. Ranzi, N. Chaumeix, et T. Faravelli. 2016c. « LAMINAR FLAME SPEEDS OF PENTANOL ISOMERS: AN EXPERIMENTAL AND MODELING STUDY ». Combustion and Flame 166 (avril): 1-18.

Nicholls, J. A., H. R. Wilkinson, et R. B. Morrison. 1957. « INTERMITTENT DETONATION AS A THRUST-PRODUCING MECHANISM ». Journal of Jet Propulsion 27 (5): 534-41.

Nicholls, J.A., E.K. Dabora, et R.L. Gealer. 1985. «STUDIES IN CONNECTION WITH STABILIZED GASEOUS DETONATION WAVES» Symposium (International) on Combustion, 7, n° 1 : 766-772.

Nicholls, J.A., H.R. Wilkinson, et R.B. Morrison. 1957. «INTERMITTENT DETONATION AS A THRUST-PRODUCING MECHANISM» Journal of Jet propulsion, 27 : 534-541.

Oran, E. S., et V. N. Gamezo. 2007. « ORIGINS OF THE DEFLAGRATION-TO-DETONATION TRANSITION IN GAS-PHASE COMBUSTION ». Combustion and Flame 148 (1-2): 4-47.

Penyazkov, O.G., K.A. Ragotner, A.J. Dean, et B. Varatharajan. 2005. « AUTOIGNITION OF PROPANE–AIR MIXTURES BEHIND REFLECTED SHOCK WAVES ». Proceedings of the Combustion Institute 30 (2): 1941-47.

Pinard, P.F., A.J. Higgins, et J.H.S. Lee. 2004. « THE EFFECTS OF NO₂ ADDITION ON DEFLAGRATION-TO-DETONATION TRANSITION ». Combustion and Flame 136 (1-2): 146-54.

« PULSED DETONATION ENGINE FLIES INTO HISTORY > Wright-Patterson AFB > Article Display ». 2008. 2008.

Qin, Z., V. V. Lissianski, H. Yang, W. C. Gardiner, Scott G. Davis, et Hai Wang. 2000. « COMBUSTION CHEMISTRY OF PROPANE: A CASE STUDY OF DETAILED REACTION MECHANISM OPTIMIZATION ». Proceedings of the Combustion Institute 28 (2): 1663-69.

Razus, D., D. Oancea, V. Brinzea, M. Mitu, et C. Movileanu. 2010. « EXPERIMENTAL AND COMPUTED BURNING VELOCITIES OF PROPANE–AIR MIXTURES ». Energy Conversion and Management 51 (12): 2979-84.

Remeev, N.Kh., V.V. Vlasenko, R.A. Khakimov, et V.V. Ivanov. 2001. «STATUS AND PROBLEMS OF DEVELOPMENT OF TECHNOLOGY FOR DETONATION PULSATING AIR-BREATHING JET ENGINE» Russian Journal of Physical Chemistry B 20, n° 7: 119-129.

Ronney, P. D., et G. I. Sivashinsky. 1989. « A THEORETICAL STUDY OF PROPAGATION AND EXTINCTION OF NONSTEADY SPHERICAL FLAME FRONTS ». SIAM Journal on Applied Mathematics 49 (4): 1029-46.

Roy, G.D., S.M. Frolov, A.A. Borisov, et D.W. Netzer. 2004. « PULSE DETONATION PROPULSION: CHALLENGES, CURRENT STATUS, AND FUTURE PERSPECTIVE ». Progress in Energy and Combustion Science 30 (6): 545-672.

Roy, G., et S. Frolov. 2010. « DEFLAGRATIVE AND DETONATIVE COMBUSTION ». Moscou: Torus.

Saeed, K., et R. Stone. 2007. «LAMINAR BURNING VELOCITIES OF PROPENE–AIR MIXTURES AT ELEVATED TEMPERATURES AND PRESSURES» Journal of the Energy Institute.

Santner, J., F.M. Haas, Y. Ju, et Frederick L. Dryer. 2014. « UNCERTAINTIES IN INTERPRETATION OF HIGH-PRESSURE SPHERICAL FLAME PROPAGATION RATES DUE TO THERMAL RADIATION ». Combustion and Flame 161 (1): 147-53.

Sargent, W. H., et R. A. Gross. 1960. « DETONATION WAVE HYPERSONIC RAMJET ». ARS Journal 30 (6): 543-49.

Schauer, F., C.L. Miser, K.C. Tucker, R.P. Bradley, et J.L Hoke. 2005. « DETONATION INITIATION OF HYDROCARBON-AIR MIXTURES IN A PULSED DETONATION ENGINE ».

Schauer, F., J. Stutrud, et R. Bradley. 2001. « DETONATION INITIATION STUDIES AND PERFORMANCE RESULTS FOR PULSED DETONATION ENGINE APPLICATIONS ». In 39th Aerospace Sciences Meeting and Exhibit. Reno,NV,U.S.A.: American Institute of Aeronautics and Astronautics.

Schauer, F., J. Stutrud, et R. Bradley. 2001. « DETONATION INITIATION STUDIES AND PERFORMANCE RESULTS FOR PULSED DETONATION ENGINE APPLICATIONS ». In 39th Aerospace Sciences Meeting and Exhibit. Reno,NV,U.S.A.: American Institute of Aeronautics and Astronautics.

Schelkin, K.L. Soviet journal Technical. Physics 10 (1940): 823-827.

Shchelkin.k, et Troshin.Y. Gasdynamics of combustion. Baltimore: Mono Book Corp, 1963.

Shen, I.w., et T.C. Adamson. 1973. « THEORETICAL ANALYSIS OF A ROTATING TWO PHASE DETONATION IN A ROCKET MOTOR ».

Silvestrini, M., B. Genova, G. Parisi, et F.J. Leon Trujillo. 2008. « FLAME ACCELERATION AND DDT RUN-UP DISTANCE FOR SMOOTH AND OBSTACLES FILLED TUBES ». Journal of Loss Prevention in the Process Industries 21 (5): 555-62.

Smith, N., M. Moser, C. Kopicz, Jr., et R. Herdy. 2000. « NITROUS OXIDE/PROPANE ROCKET TEST RESULTS ». In 36th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference and Exhibit. Las Vegas,NV,U.S.A.: American Institute of Aeronautics and Astronautics.

Sorin, R. 2006. « ETUDE ET OPTIMISATION DE LA TRANSITION DEFLAGRATION DETONATION (TDD) EN TUBE DES MELANGES STOECHIMETRIQUES $H_2/O_2/N_2$ ET $(CH_4, C_2H_2, C_2H_4$ ET $C_3H_8)/O_2/N_2$ ET DE SA TRANSMISSION A UN ESPACE DE PLUS GRANDE DIMENSION » thèse, Poitiers: Université de Poitiers.

Spindler, C.L., R.H. Nunn, L.J. Krzycki, et H. Powell Jenkins Jr. 1962. «STANDING DETONATION WAVE ROCKET ENGINE» JANAF Symposium. San Francisco.

Takizawa, K., A. Takahashi, K. Tokuhashi, S. Kondo, et A. Sekiya. 2005. « BURNING VELOCITY MEASUREMENT OF FLUORINATED COMPOUNDS BY THE SPHERICAL-VESSEL METHOD ». Combustion and Flame 141 (3): 298-307.

Tang, C., Z. Huang, C. Jin, J. He, J. Wang, X. Wang, et H. Miao. 2008. « LAMINAR BURNING VELOCITIES AND COMBUSTION CHARACTERISTICS OF PROPANE–HYDROGEN–AIR PREMIXED FLAMES ». International Journal of Hydrogen Energy 33 (18): 4906-14.

Tangirala, V.E., A.J. Dean, P.F. Pinard, et B. Varatharajan. 2005. « INVESTIGATIONS OF CYCLE PROCESSES IN A PULSED DETONATION ENGINE OPERATING ON FUEL–AIR MIXTURES ». Proceedings of the Combustion Institute 30 (2): 2817-24.

Teodorczyk, A., J.H.S. Lee, et R. Knystautas. 1989. « PROPAGATION MECHANISM OF QUASI-DETONATIONS ». Symposium (International) on Combustion 22 (1): 1723-31.

Tiliakos, N., J. Tyll, R. Herdy, D. Sharp, M. Moser, et N. Smith. 2001. « DEVELOPMENT AND TESTING OF A NITROUS OXIDE/PROPANE ROCKET ENGINE ». In 37th Joint Propulsion Conference and Exhibit. Salt Lake City, UT, U.S.A.: American Institute of Aeronautics and Astronautics.

Urtiew, P.A., et A.K. Oppenheim. 1966. «EXPERIMENTAL OBSERVATIONS OF THE TRANSITION TO DETONATION IN AN EXPLOSIVE GAS» The royal society 295: 13-28.

Vagelopoulos, C.M., F.N. Egolfopoulos, et C.K. Law. 1994. « FURTHER CONSIDERATIONS ON THE DETERMINATION OF LAMINAR FLAME SPEEDS WITH THE COUNTERFLOW TWIN-FLAME TECHNIQUE ». Symposium (International) on Combustion 25 (1): 1341-47.

Vagelopoulos, C.M., et F.N. Egolfopoulos. 1998. « DIRECT EXPERIMENTAL DETERMINATION OF LAMINAR FLAME SPEEDS ». Symposium (International) on Combustion 27 (1): 513-19.

Veloo, P. S., et Fokion N. Egolfopoulos. 2011. « STUDIES OF N-PROPANOL, ISO-PROPANOL, AND PROPANE FLAMES ». *Combustion and Flame* 158 (3): 501-10.

Voitsekhovskii, B.V. 1960. «MAINTAINED DETONATIONS» In *Soviet Physics Doklady* 4: 1207.

Wang, K., W. Fan, W. Lu, Q. Zhang, F. Chen, C. Yan, et Q. Xia. 2015. « PROPULSIVE PERFORMANCE OF A PULSE DETONATION ROCKET ENGINE WITHOUT THE PURGE PROCESS ». *Energy* 79 (janvier): 228-34.

Wang, Z., W. Qin., J. Huang., L. Wei., Y. Yang., Y. Wang., et Y. Zhang. 2022. « NUMERICAL INVESTIGATION OF THE EFFECT OF JET INTENSITY FROM INTERNAL JET TUBE ON DETONATION INITIATION CHARACTERISTICS ». *International Journal of Hydrogen Energy* 47 (28): 13732-45.

Westbrook, C. K., et P. A. Urtiew. 1982. « CHEMICAL KINETIC PREDICTION OF CRITICAL PARAMETERS IN GASEOUS DETONATIONS ». *Symposium (International) on Combustion* 19 (1): 615-23.

Wintenberger, E., J. M. Austin, M. Cooper, S. Jackson, et J. E. Shepherd. 2003. « ANALYTICAL MODEL FOR THE IMPULSE OF SINGLE-CYCLE PULSE DETONATION TUBE ». *Journal of Propulsion and Power* 19 (1): 22-38.

Wintenberger, E., et J. E. Shepherd. 2006. « INTRODUCTION TO “TO THE QUESTION OF ENERGY USE OF DETONATION COMBUSTION” BY YA. B. ZEL'DOVICH ». *Journal of Propulsion and Power* 22 (3): 586-87.

Wolański, P. 2013. « DETONATIVE PROPULSION ». *Proceedings of the Combustion Institute* 34 (1): 125-58.

Wolanski, P., et S. Wojcicki. 1977. «ON THE MECHANISM OF INFLUENCE OF OBSTACLES ON THE FLAME PROPAGATION» ICDERS. Stockholm.

Wu, F., W. Liang, Z. Chen, Y. Ju, et C.K. Law. 2015. « UNCERTAINTY IN STRETCH EXTRAPOLATION OF LAMINAR FLAME SPEED FROM EXPANDING SPHERICAL FLAMES ». *Proceedings of the Combustion Institute* 35 (1): 663-70.

Wright-Patterson AFB « Pulsed detonation engine flies into history, Article Display ». Consulté le 4 octobre 2023. <https://www.wpafb.af.mil/News/Article-Display/Article/400875/pulsed-detonation-engine-flies-into-history/>.

Yap, D., J. Karlovsky, A. Megaritis, M.L. Wyszynski, et H. Xu. 2005. « AN INVESTIGATION INTO PROPANE HOMOGENEOUS CHARGE COMPRESSION IGNITION (HCCI) ENGINE OPERATION WITH RESIDUAL GAS TRAPPING ». *Fuel* 84 (18): 2372-79.

Yeom, K., J. Jang, et C. Bae. 2007. « HOMOGENEOUS CHARGE COMPRESSION IGNITION OF LPG AND GASOLINE USING VARIABLE VALVE TIMING IN AN ENGINE ». *Fuel* 86 (4): 494-503.

Yu, H., W. Han, J. Santner, X. Gou, C. Sohn, Y. Ju, et Z. Chen. 2014. « RADIATION-INDUCED UNCERTAINTY IN LAMINAR FLAME SPEED MEASURED FROM PROPAGATING SPHERICAL FLAMES ». *Combustion and Flame* 161 (11): 2815-24.

Yu, G., C.K. Law., et C.K. Wu. 1986. « LAMINAR FLAME SPEEDS OF HYDROCARBON + AIR MIXTURES WITH HYDROGEN ADDITION ». *Combustion and Flame* 63 (3): 339-47.

Zeng, L., H. Liang, et Q. Zhang. 2021. « DETONATION CHARACTERISTICS OF GASEOUS ISOPROPYL NITRATE AT HIGH CONCENTRATIONS ». *Central European Journal of Energetic Materials* 18 (2): 245-70.

Zhao, Z., A. Kazakov., J. Li., et F. L. Dryer. 2004. « THE INITIAL TEMPERATURE AND N₂ DILUTION EFFECT ON THE LAMINAR FLAME SPEED OF PROPANE/AIR ». *Combustion Science and Technology* 176 (10): 1705-23.

Zhou, J., L. Ding., J. An, Y. Zhu., et Y. Liang. 2017. « STUDY ON THE THERMAL BEHAVIORS OF NANO-AL BASED FUEL AIR EXPLOSIVE ». *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry* 130 (2): 1111-16.

Zitoun, R., et D. Desbordes. 1999. « PROPULSIVE PERFORMANCES OF PULSED DETONATIONS ». *Combustion Science and Technology* 144 (1-6): 93-114.