



9^e journée CaSciModOT
11 décembre 2008
Orléans



Simulation des détonations dans le milieu gazeux sur des plateformes de calcul parallèle

Dmitry DAVIDENKO



Plan de l'exposé

I. Introduction

II. Modèle globale de détonation

III. Modèle 1D de détonation stationnaire

IV. Modèle 2D de détonation non stationnaire

V. Conclusions et perspectives

Plan de l'exposé

I. Introduction

II. Modèle globale de détonation

III. Modèle 1D de détonation stationnaire

IV. Modèle 2D de détonation non stationnaire

V. Conclusions et perspectives

Détonation : Événement dangereux

➔ Explosions accidentelles dans :

➤ les usines

➤ les dépôts

➤ les mines

➤ le transport



➔ Utilisation malintentionnée d'armes et d'explosifs



➔ Défaillance des systèmes à combustion



Détonation : Applications pratiques

➔ **Armes**



➔ **Travaux miniers**



➔ **Démolition**



➔ **Procédés industriels**

➔ **Propulsion**



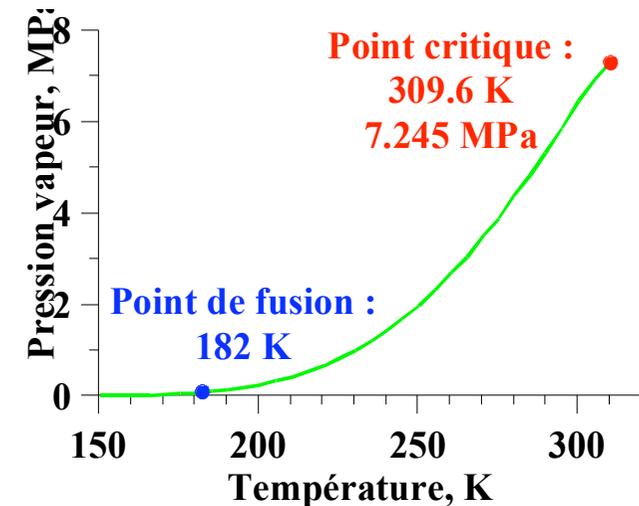
Mélange H₂-N₂O

➔ Protoxyde d'azote (N₂O)

- Stabilité et basse pression vapeur (facilité de stockage)
- Meilleur oxydant que l'air
- Applications :
médecine, pharmacologie, aérosols,
moteurs automobile, moteurs fusée

➔ Hydrogène – Protoxyde d'azote

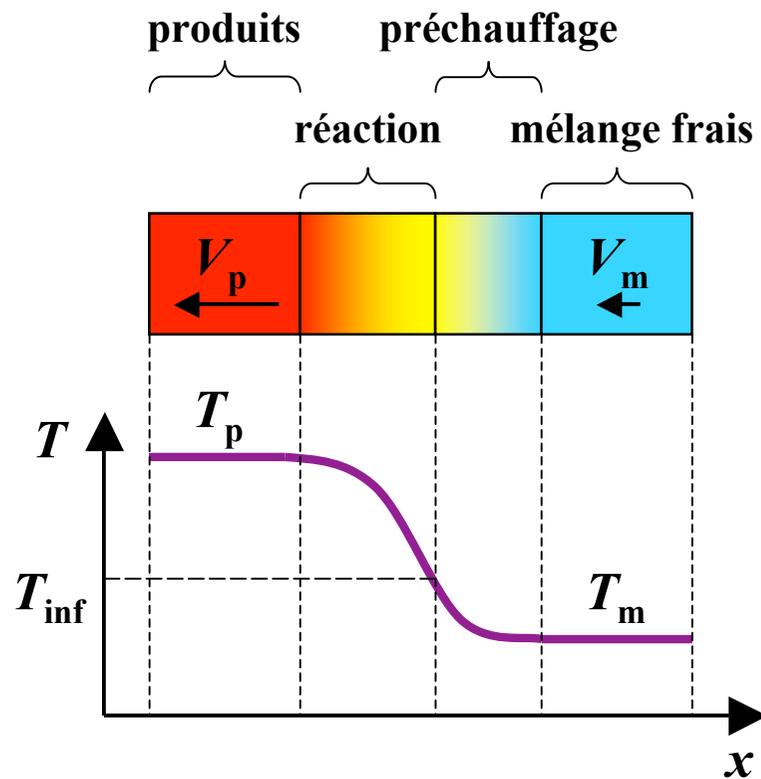
- Propergols
- Mélange détonant ⇒ Risque industriel pour :
 - production de semi-conducteur du silane (Si H₄)
 - stockage de déchets nucléaires



Régimes de propagation de la flamme

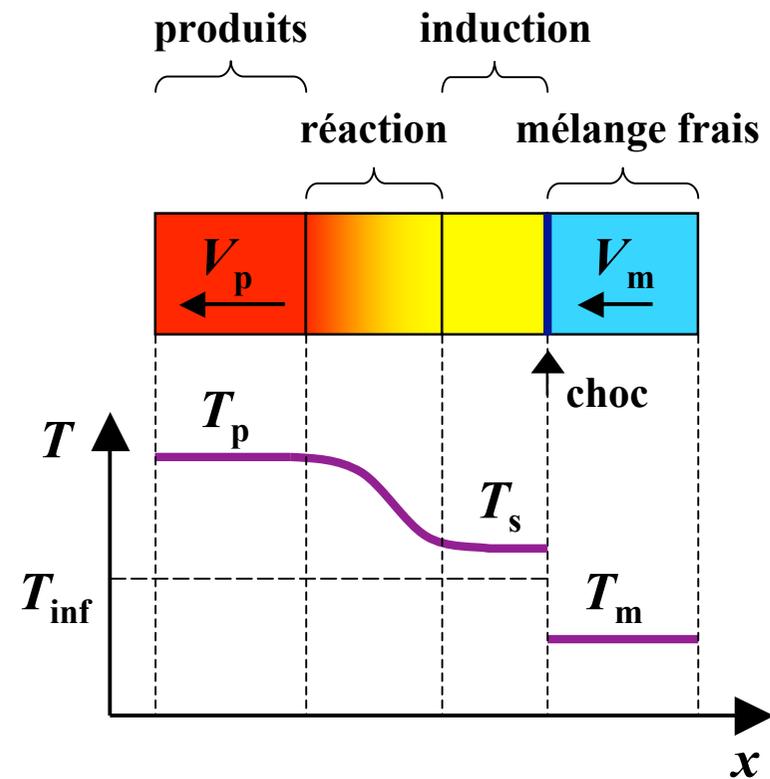
Déflagration

Propagation lente
de 0,1 m/s à 10 m/s



Détonation

Propagation rapide
de quelques km/s



Plan de l'exposé

I. Introduction

II. Modèle globale de détonation

III. Modèle 1D de détonation stationnaire

IV. Modèle 2D de détonation non stationnaire

V. Conclusions et perspectives

Modèle global de détonation

Hypothèses

Écoulement est : stationnaire, 1D, sans pertes

Quantités conservées entre les sections :

Mélange « m » – Choc « s » – Produits « p »

- ⇒ Débit massique ρV
- ⇒ Impulsion $\rho V^2 + P$
- ⇒ Enthalpie totale $h + \frac{1}{2} V^2$

Modèle global de détonation

Modèle thermodynamique du fluide

- ➔ Équation d'état du gaz parfait

$$P = \rho R T$$

- ➔ Constante du gaz

$$R = \sum_s R_s Y_s \quad R_s = R_u / W_s$$

- ➔ Enthalpie

$$h(T, Y_s) = \sum_s \left[h_s^o + \int_{T^o}^T c_{P_s}(T) dT \right]$$

Modèle global de détonation

Équilibre chimique

➔ Réactions de dissociation pour H_2 , N_2O , O_2 , H_2O , OH , N_2



Expression généralisée $\text{H}_n\text{O}_m\text{N}_l \rightleftharpoons n\text{H} + m\text{O} + l\text{N}$

➔ Conservation de la matière

$$P = \sum_s p_s \quad \frac{Y_{\text{H}}}{A_{\text{H}}} \frac{A_{\text{O}}}{Y_{\text{O}}} = \frac{\sum_s n_s N_s}{\sum_s m_s N_s} \quad \frac{Y_{\text{N}}}{A_{\text{N}}} \frac{A_{\text{O}}}{Y_{\text{O}}} = \frac{\sum_s l_s N_s}{\sum_s m_s N_s}$$

➔ Loi d'action de masse

$$K_{C_s} = \frac{C_{\text{H}}^{n_s} C_{\text{O}}^{m_s} C_{\text{N}}^{l_s}}{C_s} \quad C_s = \rho \frac{Y_s}{W_s}$$

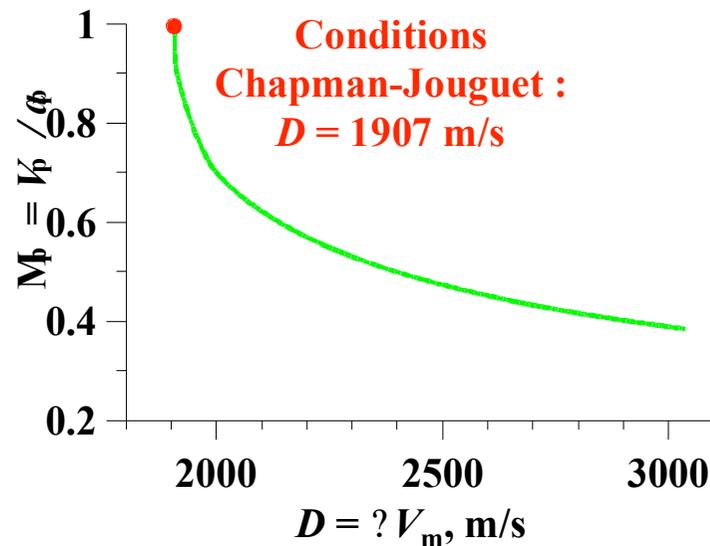
Exemple : Détonation H₂-N₂O-Ar

Conditions initiales

- Pression 10,2 kPa (0,101 atm)
- Température 297 K (24°C)
- Composition volumiques 30% H₂ + 30% N₂O + 40% Ar

Résultats

Nombre de Mach des produits
= f (vitesse de propagation)



Conditions pour la détonation CJ

	Mélange	Choc	Produits
M	5,58	0,388	1
P / P_m	1	37,5	20,9
T (K)	297	1860	3140

Limitations du modèle global

- ⇒ **Approche globale d'équilibre chimique permet de calculer :**
 - ↳ états derrière le choc et dans les produits de combustion
 - ↳ vitesse théorique de propagation
- ⇒ **Pour étudier la structure d'une détonation, il faut adopter l'approche de cinétique chimique à taux de réaction finis**

Plan de l'exposé

I. Introduction

II. Modèle globale de détonation

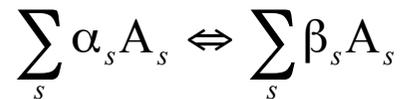
III. Modèle 1D de détonation stationnaire

IV. Modèle 2D de détonation non stationnaire

V. Conclusions et perspectives

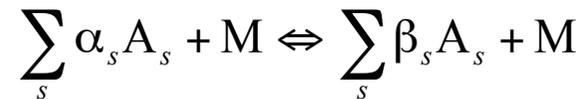
Modèle cinétique chimique

Réaction d'échange



$$\omega_f = k_f \prod_s C_s^{\alpha'_s} \quad \omega_b = k_b \prod_s C_s^{\beta'_s}$$

Réaction de dissociation-recombinaison



$$\omega_f = k_f C_M \prod_s C_s^{\alpha'_s} \quad \omega_b = k_b C_M \prod_s C_s^{\beta'_s}$$

Constante de vitesse (k_f, k_b)

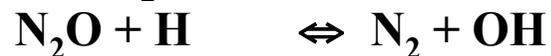
Loi d'Arrhenius

$$k = AT^b \exp\left(-\frac{E}{R_u T}\right)$$

Taux de production d'une espèce chimique

$$\dot{m}_s = W_s \sum_{r=1}^{N_r} (\beta_{sr} - \alpha_{sr}) (\omega_{fr} - \omega_{br})$$

Mecanisme réactionnel pour $\text{H}_2, \text{N}_2\text{O}, \text{H}_2\text{O}, \text{N}_2, \text{H}, \text{O}, \text{OH}$



Modèle Zeldovich – von Neumann - Döring

Équations d'Euler 1D stationnaires

⇒ **Continuité**

$$\frac{d\rho V}{dx} = 0$$

⇒ **Enthalpie totale**

$$\rho V \left(\frac{dh}{dx} + V \frac{dV}{dx} \right) = 0$$

⇒ **Quantité de mouvement**

$$\rho V \frac{dV}{dx} + \frac{dP}{dx} = 0$$

⇒ **Espèces chimiques**

$$\rho V \frac{dY_s}{dx} = \dot{m}_s$$

Méthode de résolution

⇒ **Transformation en système d'EDO**

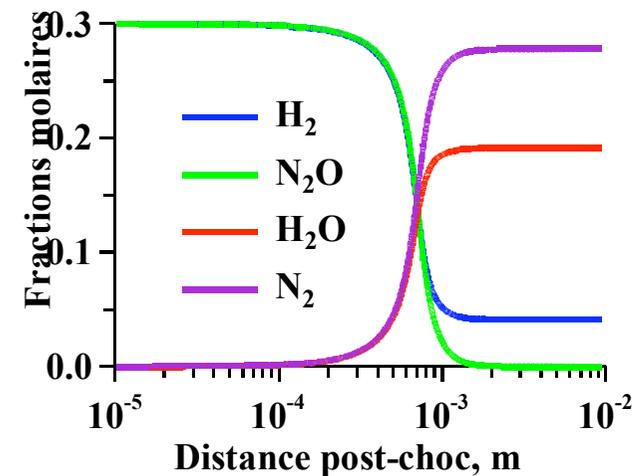
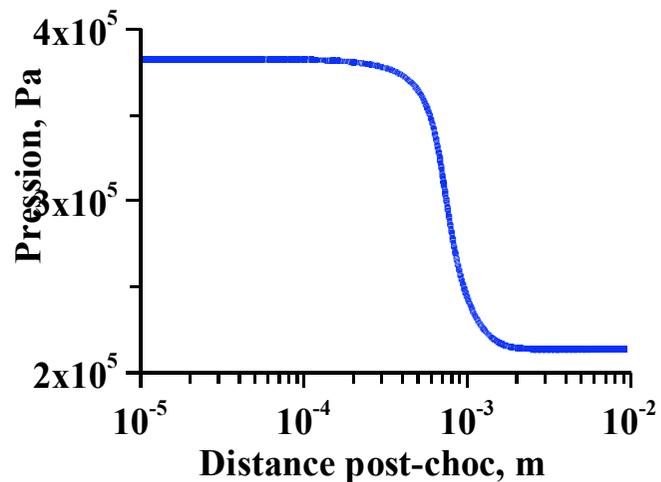
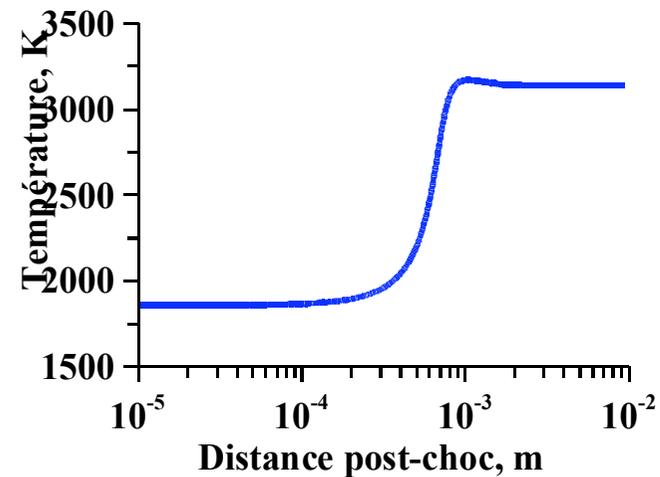
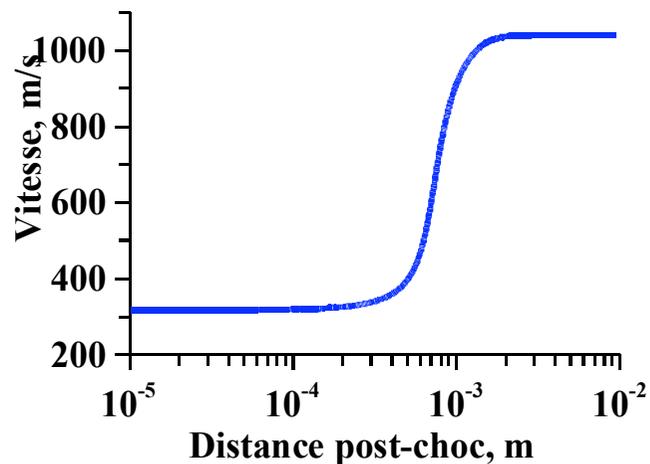
⇒ **Utilisation d'un intégrateur pour EDO raides**

Structure de la détonation stationnaire

Résultats ZND pour la détonation Chapman-Jouguet

Conditions initiales : 30% H₂ + 30% N₂O + 40% Ar en volume

$P_m = 10,2 \text{ kPa}$, $T_m = 297 \text{ K}$, $D_{CJ} = 1907 \text{ m/s}$



Limitations du modèle ZND

- ➔ **L'application du modèle ZND est limitée à :**
 - régime stationnaire (CJ ou surpressé)
 - configuration 1D
- ➔ **Pour étudier la propagation libre d'une détonation, il faut adopter l'approche non stationnaire**

Plan de l'exposé

I. Introduction

II. Modèle globale de détonation

III. Modèle 1D de détonation stationnaire

IV. Modèle 2D de détonation non stationnaire

V. Conclusions et perspectives

Modèle de détonation non stationnaire

Équations d'Euler 2D

⇒ **Continuité**

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j}{\partial x_j} = 0$$

⇒ **Énergie totale**

$$\frac{\partial (e + \frac{1}{2} u_i u_i)}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j (h + \frac{1}{2} u_i u_i)}{\partial x_j} = 0$$

⇒ **Quantité de mouvement**

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_j} + \frac{\partial P}{\partial x_i} = 0$$

⇒ **Espèces chimiques**

$$\frac{\partial \rho Y_s}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j Y_s}{\partial x_j} = \dot{m}_s$$

Méthode de résolution

⇒ **Approximation spatiale des flux : schéma WENO d'ordre 5**

⇒ **Intégration temporelle : RK additif semi-implicite d'ordre 2**

Code de calcul

⇒ **Développeurs : Davidenko (ICARE), Kudryavtsev (ITAM)**

⇒ **Caractéristiques principales**

↳ **Solveur Euler 1D et 2D pour les écoulements compressibles réactifs**

↳ **Différences finies en formulation conservative**

↳ **Maillage structuré orthogonal**

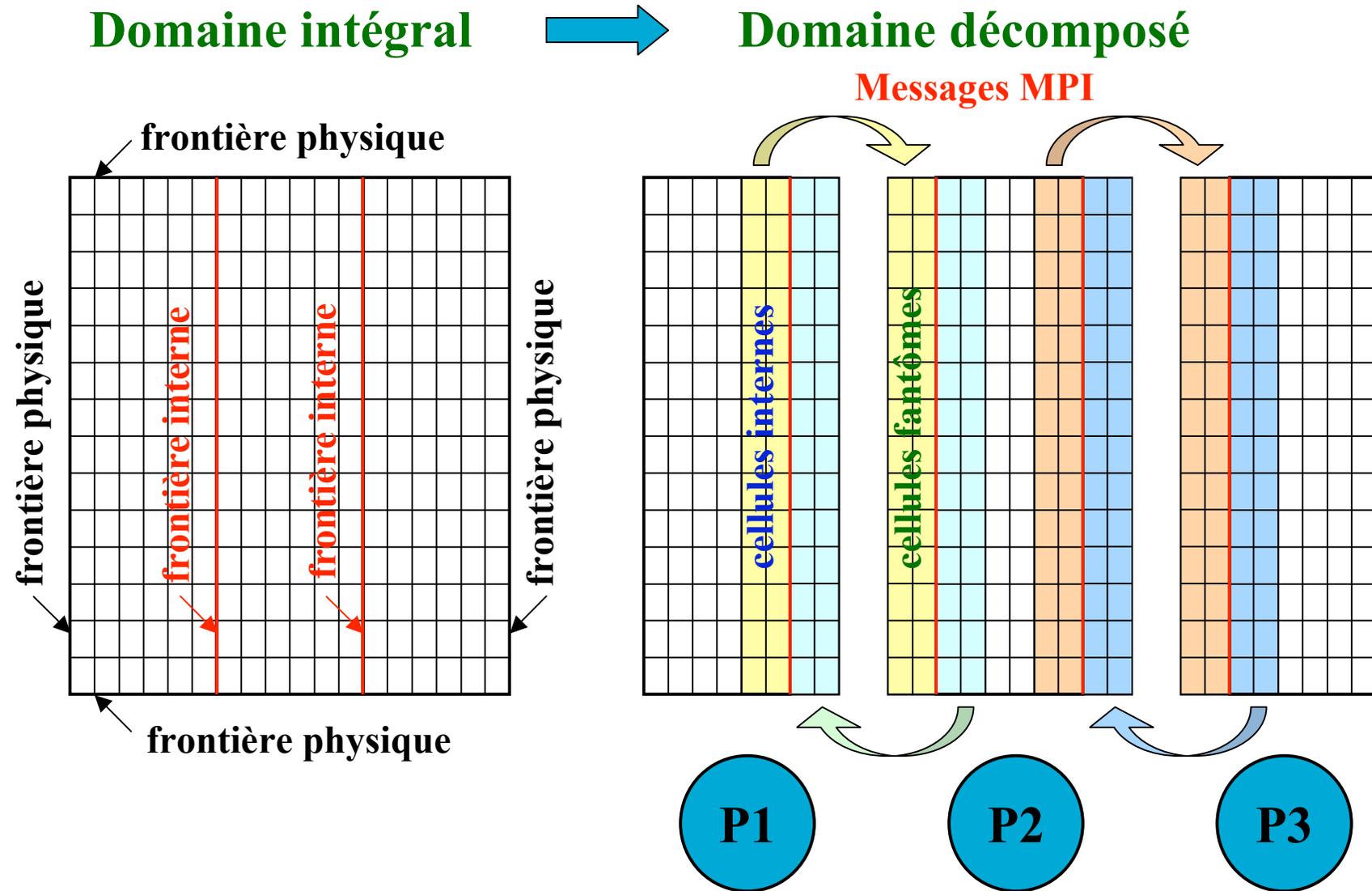
↳ **Parallélisation par décomposition du domaine**

Code de calcul

Algorithme global

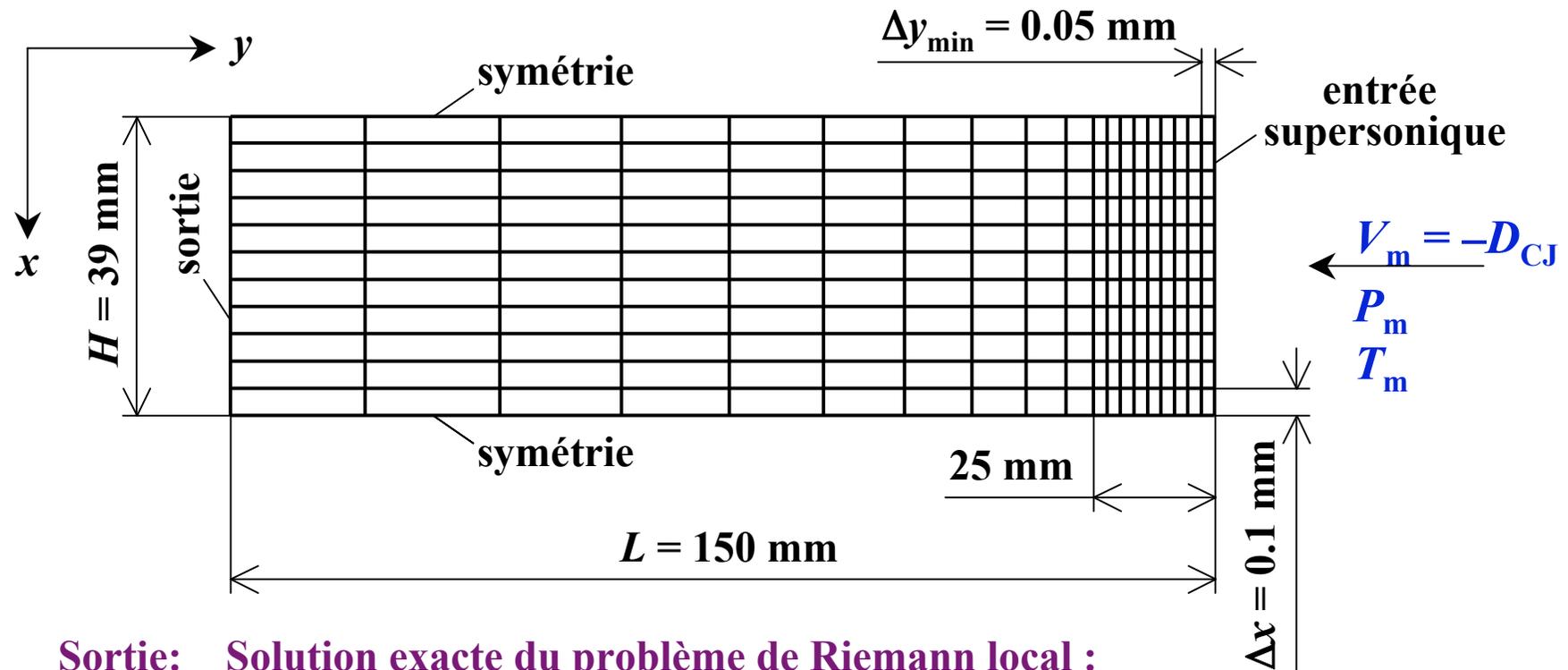
- ↪ **Initialisation de la solution**
- ↪ **Boucle en temps**
 - ↪ **Pas de temps limité par CFL + réduction MPI**
 - ↪ **Itération RK**
 - ↪ **Application des conditions aux limites**
 - frontières physiques
 - frontières internes (échanges MPI)
 - ↪ **Calcul des dérivés des flux (WENO)**
 - ↪ **Calcul des termes sources (modèle chimique)**
 - ↪ **Mise à jour de la solution**
 - ↪ **Reconstruction du maillage et redistribution de la solution (MPI)**

Principe de décomposition du domaine



Domaine de calcul

Maillage 2D et conditions aux limites (pivoté à droite)



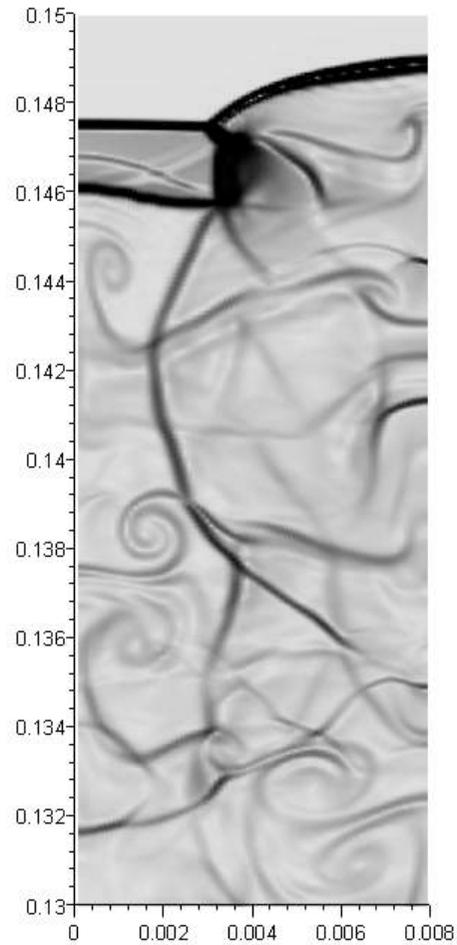
Sortie: Solution exacte du problème de Riemann local :
cellule interne en amont – conditions CJ en aval

Conditions d'entrée

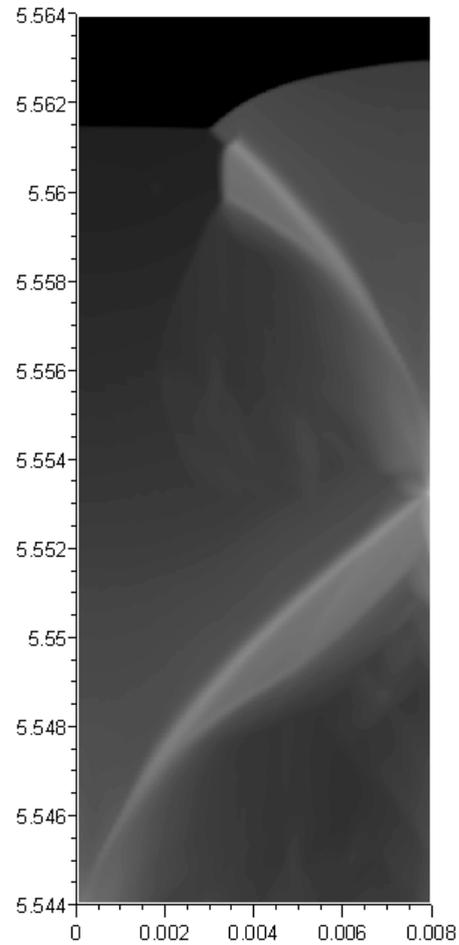
$P_m = 10,2 \text{ kPa}$, $T_m = 297 \text{ K}$, 30% H₂ + 30% N₂O + 40% Ar en volume

Exemple : détonation 2D

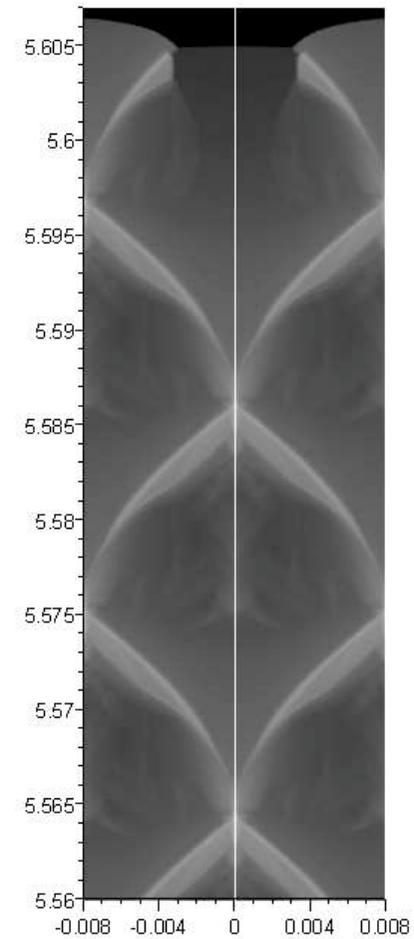
**Visualisation
(gradient de densité)**



**« Feuille de suie »
(pression max)**

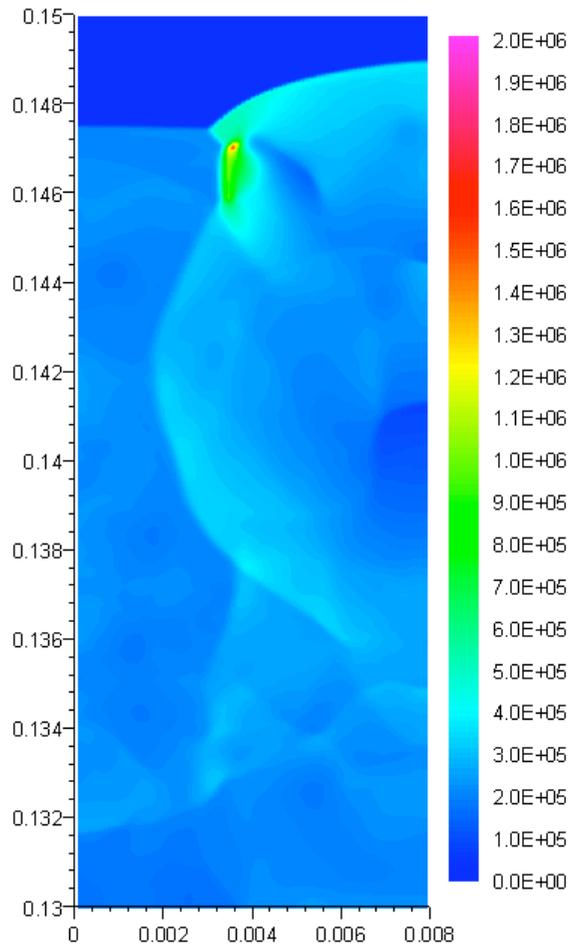


**« Feuille de suie »
(symétrie par réflexion)**

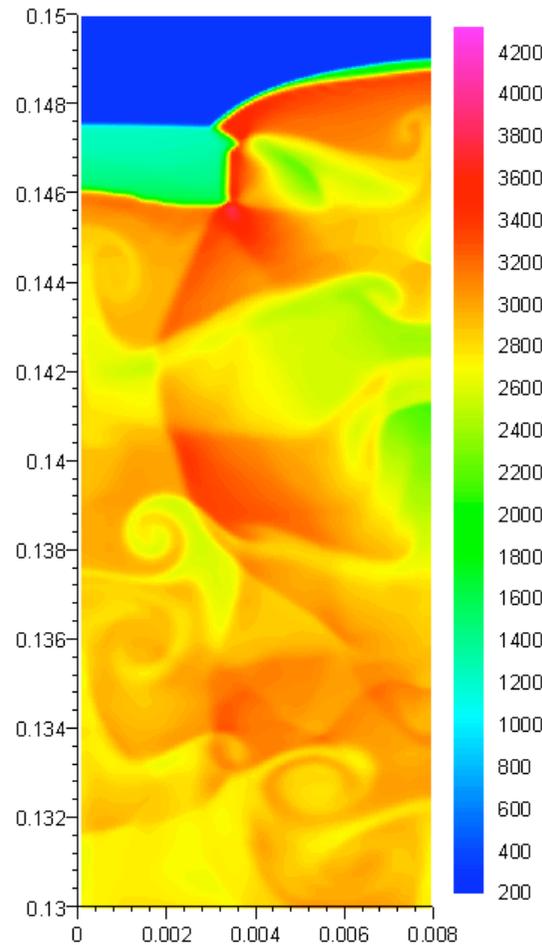


Exemple : détonation 2D

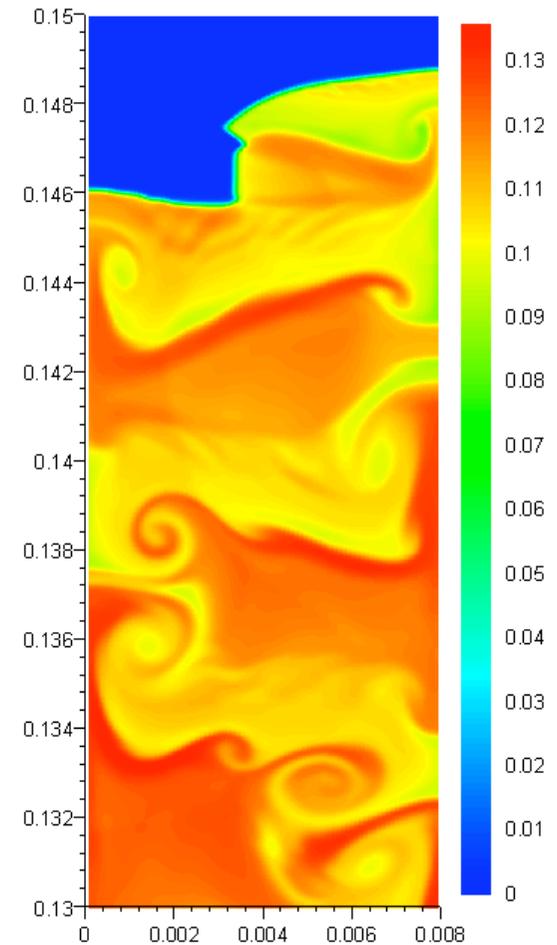
Pression statique (Pa)



Température statique (K)

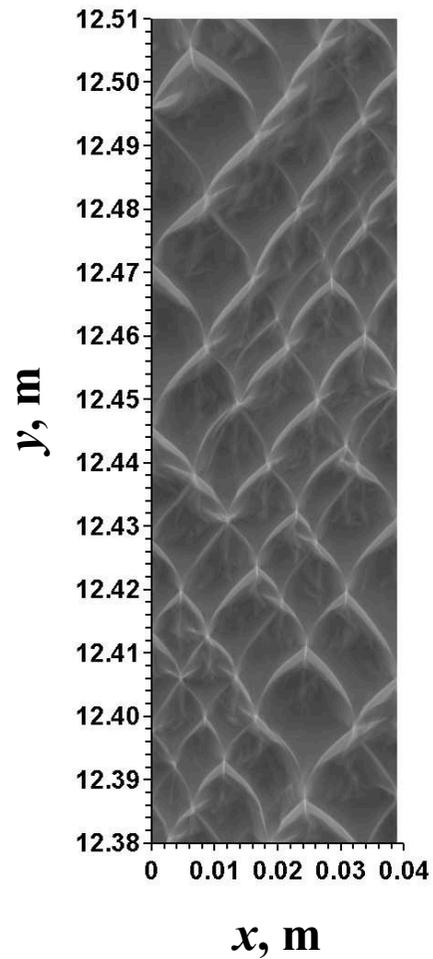


Fraction massique H₂O

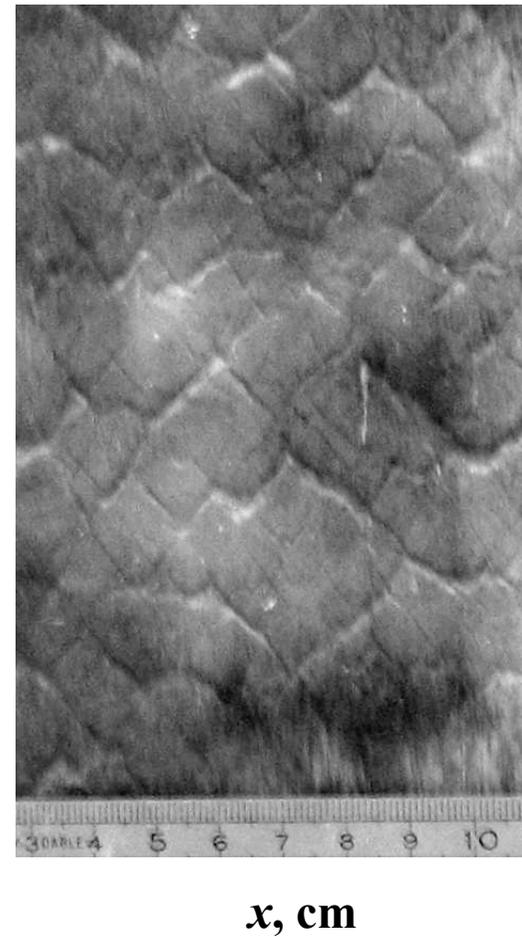


Cellules de détonation

Feuille de suie
numérique



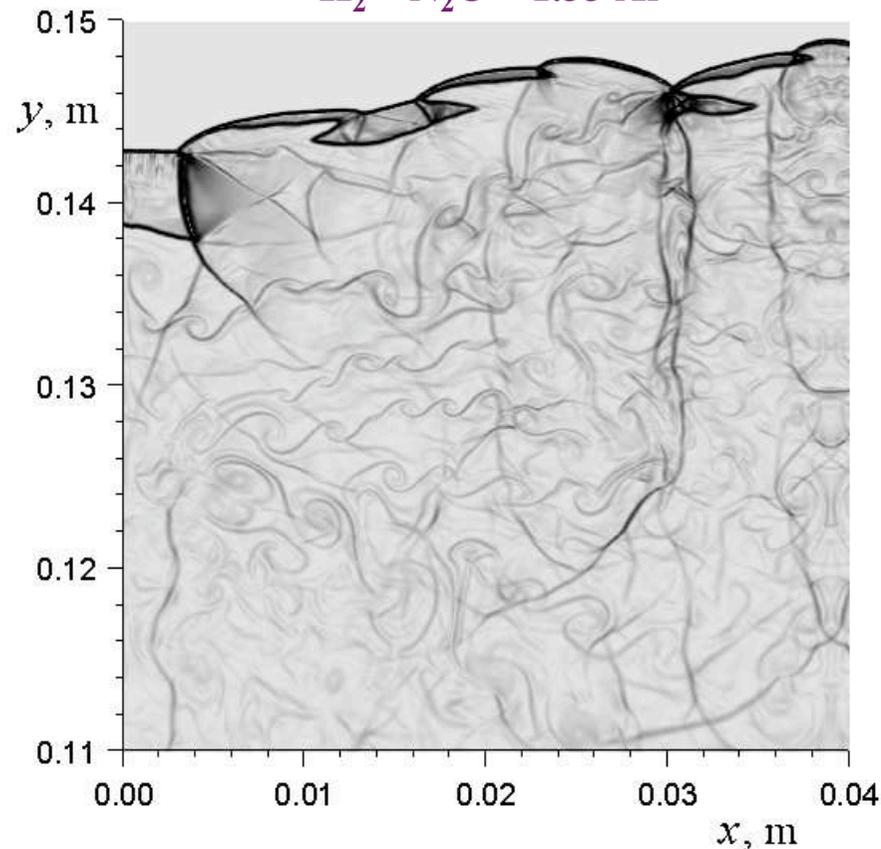
Feuille de suie
expérimentale



Front de la détonation

Visualisation numérique

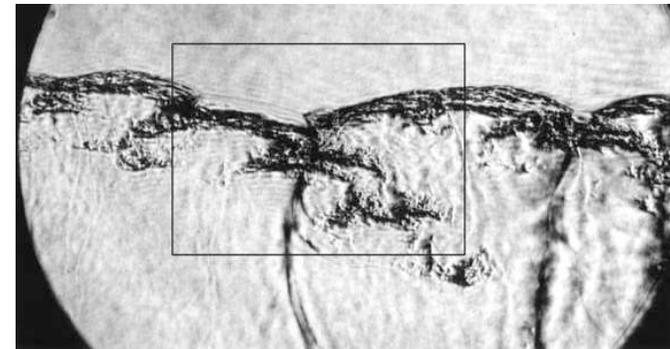
$\text{H}_2 - \text{N}_2\text{O} - 1.33 \text{ Ar}$



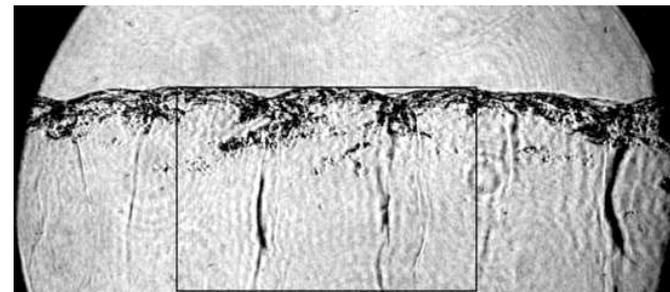
Visualisation expérimentale J.

Austin, Caltech, 2003

$\text{H}_2 - \text{N}_2\text{O} - 1.64 \text{ N}_2$



$\text{H}_2 - \text{N}_2\text{O} - 1.33 \text{ N}_2$



- ➔ Structures similaires dans la simulation et dans l'expérience
- ➔ Fronts irréguliers avec des poches de gaz non brûlé

Plan de l'exposé

I. Introduction

II. Modèle globale de détonation

III. Modèle 1D de détonation stationnaire

IV. Modèle 2D de détonation non stationnaire

V. Conclusions et perspectives

Conclusions et perspectives

➔ Simulation de la détonation nécessite des plateformes parallèles

- ↪ Large spectre d'échelles en configuration multidimensionnelle
- ↪ Résolution fine en temps et en espace
- ↪ Schémas numériques d'ordre élevé
- ↪ Modèles thermochimiques détaillés

➔ Amélioration d'outils de simulation

- ↪ Création d'une plate-forme de calcul scientifique à l'ICARE
- ↪ Application des techniques de tabulation pour le traitement de systèmes réactifs complexes
- ↪ Intégration de techniques d'adaptation dynamique de maillage (*Adaptive Mesh Refinement*)