



Approche mésoscopique en détonique

Nous présentons un modèle de simulation mésoscopique s'inspirant des méthodes de particules dissipatives (« Dissipative Particle Dynamics »), où les molécules sont remplacées par des mésoparticules. Chaque mésoparticule possède un degré de liberté interne représentant la dynamique interne des molécules (vibrons). Le passage d'une description atomique à une description mésoscopique permet ainsi de gagner un à deux ordres de grandeur dans la taille des systèmes simulés. La réactivité chimique des mésoparticules est introduite à l'aide d'une variable supplémentaire représentant le degré d'avancement de la réaction. Ce modèle réactif est appliqué à l'étude de la transition choc-détonation dans le nitrométhane liquide par des simulations de grande échelle. Les échantillons simulés ont une taille allant jusqu'à 15 microns.

J.-B. Maillot • E. Bourasseau • N. Desbiens • CEA – DAM Île-de-France

G. Vallverdu Institut pluridisciplinaire de recherche sur l'environnement et les matériaux (IPREM), Université de Pau et des Pays de l'Adour

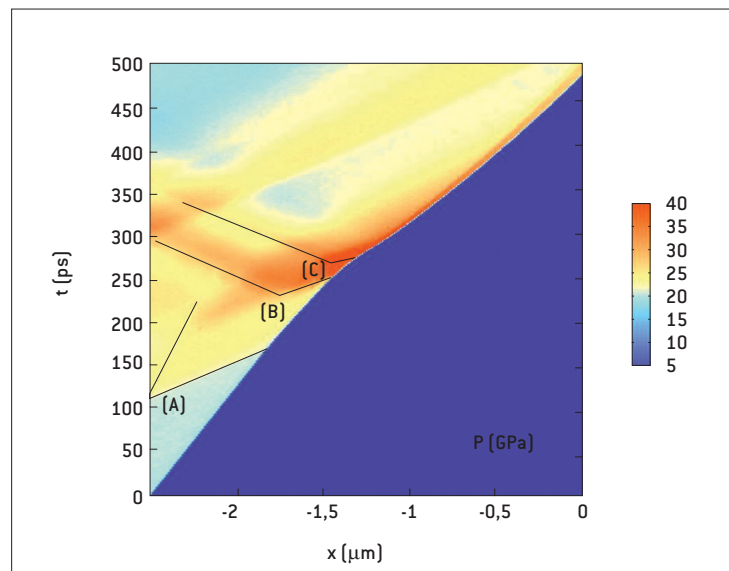
G. Stoltz Centre d'enseignement et de recherche en mathématiques et calcul scientifique (CERMICS), ENPC-INRIA, Marne-la-Vallée

La dynamique moléculaire est aujourd'hui une technique éprouvée pour l'étude des processus hors-équilibre, dont les ondes de chocs dans les métaux. L'étude des matériaux énergétiques, et en particulier la formation d'une onde réactive, est plus complexe car les dimensions spatiales et temporelles associées sont trop importantes pour en permettre la simulation directe. Dans ce contexte, une approche mésoscopique apparaît comme une alternative pertinente aux simulations atomistiques [1]. Ainsi, chaque molécule complexe est remplacée par une mésoparticule, et sa dynamique interne est modélisée par un seul degré de liberté (énergie interne mésoscopique). Pour les matériaux réactifs, des variables additionnelles λ_i sont introduites afin de modéliser l'avancement des réactions chimiques [2]. Leur dynamique est donnée par les lois standards de cinétique chimique.

L'application au nitrométhane se fait par le choix du potentiel d'interaction entre les mésoparticules, ajusté ici pour reproduire les propriétés thermodynamiques du nitrométhane sous choc. La décomposition chimique du nitrométhane est modélisée en deux étapes successives d'ordre 1 : la première est réversible et endothermique, la seconde irréversible et exothermique (les paramètres contrôlant la chimie sont choisis de manière à rendre compatible l'évolution chimique du système avec le temps total de simulation ; on modélise ainsi une chimie artificiellement « accélérée » par rapport au système réel).

Ce modèle mésoscopique est appliqué à l'étude du mécanisme de la transition choc-détonation dans le nitrométhane [3]. Pour ce faire, un échantillon d'environ 4,5 μm de long est créé, et des conditions aux limites périodiques sont appliquées dans les directions transverses au choc. Ces simulations sont effectuées en parallèle sur 8 000 processeurs de TERA 100, à l'aide du code Stamp du CEA/DAM. Un piston vient initier des chocs de

Figure 1. Diagramme de marche de la pression au cours de la transition choc-détonation.



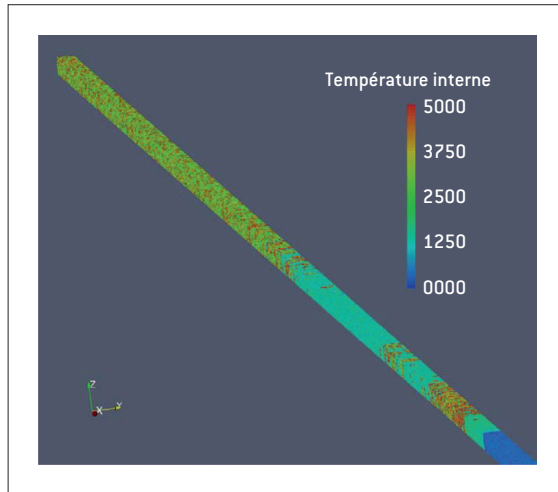


Figure 2.

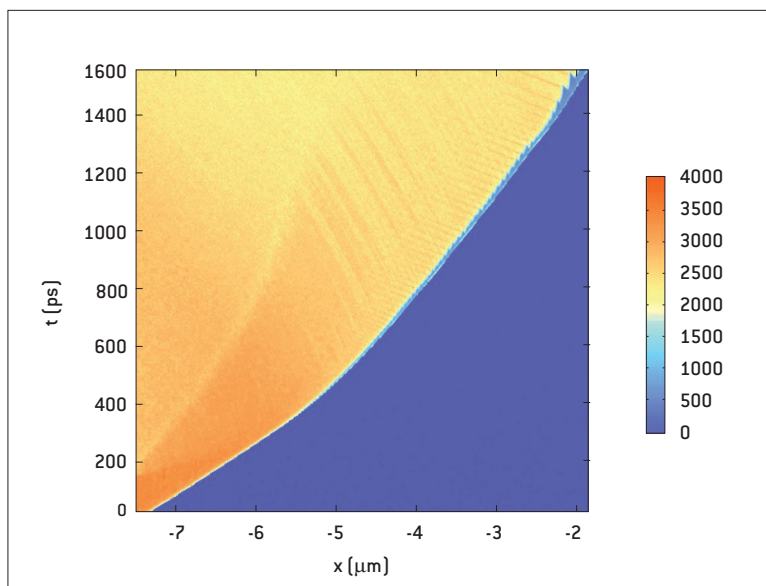
Illustration de la propagation discontinue de l'onde réactive au cours de la transition choc-détonation. Les particules sont colorées en fonction de leur température interne.

On peut éventuellement distinguer un second point d'allumage avant que l'onde réactive ne rattrape l'onde de choc (point C) pour former une onde réactive stationnaire. Ainsi, l'apparition de la détonation s'effectue par une propagation discontinue de l'onde réactive dans le milieu choqué. La **figure 2** montre une image de l'échantillon avant que l'onde réactive ne rejoigne l'onde de choc, illustrant sa propagation « par sauts ».

différentes vitesses dans l'échantillon. Le seuil de détonation est évalué autour de 2500 m/s pour ce modèle. Pour des vitesses de piston supérieures, on observe la formation d'une onde réactive dans l'état choqué (onde dite de superdétonation), qui va rattraper l'onde de choc inerte. La **figure 1** présente le diagramme de marche de la pression. On distingue nettement la formation et la propagation du choc inerte dans le système. Après environ 100 ps, des réactions chimiques se produisent près du piston (point A). Ces réactions chimiques émettent un faisceau d'ondes de compression qui se propagent plus rapidement que l'onde réactive dans le matériau inerte choqué, et qui vont augmenter la probabilité de réaction. Ainsi on remarque un point d'allumage induit (point B), à partir duquel de nouveaux trains d'ondes sont émis vers l'avant et vers l'arrière de l'échantillon.

Enfin, nous avons étudié le comportement de l'onde réactive en conditions stationnaires sur un échantillon de 14 μm . Les réactions chimiques se développent derrière le front de choc et sont initiées par les fluctuations microscopiques du système; ainsi, elles n'apparaissent pas systématiquement à la même distance du front de choc (ni au même endroit). Le comportement de l'onde réactive apparaît alors instable à cette échelle, émettant des impulsions de pression (et de température) vers l'arrière de matériau. La **figure 3** montre le diagramme de marche de la température du système, où l'on distingue la présence d'impulsions derrière le front réactif. Celles-ci pourraient contribuer à l'existence de la structure cellulaire de l'onde réactive, qui a été mise en évidence expérimentalement dans les gaz et les liquides.

Figure 3. Diagramme de marche de la température du système au cours de la propagation stationnaire de l'onde réactive.



Le développement d'un modèle mésoscopique nous a permis d'explorer les mécanismes de formation d'une onde réactive et son comportement dans des conditions stationnaires. Ces simulations permettent de mieux comprendre le lien entre certains événements microscopiques (par exemple la probabilité de réaction chimique) et le comportement macroscopique qui peut en résulter.

RÉFÉRENCES

[1] G. STOLTZ, « A reduced model for shock and detonation waves. I. The inert case », *Europhys. Lett.*, **76**, 849 [2006].
 [2] J.-B. MAILLET, L. SOULARD, G. STOLTZ, « A reduced model for shock and detonation waves. II. The reactive case », *Europhys. Lett.*, **78**, 68001 [2007].
 [3] J.-B. MAILLET, E. BOURASSEAU, N. DESBIENS, G. VALLVERDU, G. STOLTZ, « Mesoscopic simulations of shock-to-detonation transition in reactive liquid high explosive », *Europhys. Lett.*, **96**, 68007 [2011].