

# Modélisation des explosions avec postcombustion

E. LAPÉBIE - L. MUNIER / CEA – Gramat

R. SAUREL - G. HUBER - G. JOURDAN / Institut universitaire des systèmes thermiques industriels (IUSTI), Université Aix-Marseille, Marseille

R. SAUREL / Société Recherche scientifique et simulation numérique (RS2N), Roquevaire

Les codes de dynamique rapide semblent capables de simuler la détonation d'explosifs condensés dans l'air et restituent généralement bien les surpressions aériennes mesurées. Mais la physique sous-jacente est-elle pour autant bien modélisée? En fait, ces codes ne prennent pas en compte le fait qu'une partie non négligeable de l'énergie d'un explosif est dégagée lors de l'oxydation des produits de la détonation anaérobie par l'oxygène de l'air. Pour le TNT (trinitrotoluène), l'énergie spécifique de postcombustion est environ le double de l'énergie spécifique de détonation. Nous avons développé une approche innovante pour la modélisation 1D des phénomènes de mélange turbulent et de postcombustion. Le modèle, qui contient un unique paramètre, reproduit non seulement les surpressions aériennes, mais aussi le diamètre stabilisé de la boule de feu et les temps d'arrivée du choc secondaire, deux paramètres que les codes classiques échouent à restituer.

Les compétences du CEA-Gramat couvrent l'expertise sur le fonctionnement détonique et les effets de munitions, d'explosifs occasionnels ou d'explosions industrielles. Dans tous les cas, nous étudions les effets physiques générés (onde de souffle, déformation et rupture des matériaux connexes, transferts thermiques radiatifs...). Les caractéristiques de l'onde de souffle aérienne sont essentielles, car elles conditionnent les conséquences d'une explosion sur l'environnement.

On pourrait penser que le fonctionnement d'explosifs classiques soit bien modélisé. La majorité des codes néglige pourtant le fait qu'un explosif ne libère qu'une fraction de son énergie durant la détonation. Celle-ci génère des produits partiellement sous-oxygénés qui, en se mélangeant à l'air ambiant, vont subir des réactions aérobies. L'énergie libérée par ces réactions de postcombustion peut être supérieure à l'énergie de détonation.

Pour traiter correctement ces problèmes, nous avons développé un nouveau modèle de mélange turbulent et de postcombustion [1].

## État de l'art

La détonation de charges sphériques d'explosif est une expérimentation de référence qui vise à quantifier les effets d'une explosion. Les moyens de mesure et de visualisation mis en œuvre permettent, d'une part, de suivre l'évolution temporelle des surpressions générées à différentes distances et, d'autre part, de suivre le développement de la «boule de feu». L'observation de cette dernière montre de nombreuses instabilités qui traduisent un mélange turbulent (et réactif) entre les gaz de détonation et l'air (**figure 1**).

La géométrie des tests autorise une modélisation 1D sphérique des phénomènes. Les codes classiques utilisent une modélisation eulérienne, dans laquelle produits de détonation et air environnant sont séparés par une interface, sur laquelle sont respectées les conditions d'égalité de pressions et de vitesses normales. En conséquence, il ne peut pas y avoir d'interpénétration entre les deux milieux, et lorsque des instabilités se développent à l'interface, celles-ci sont pure-



Figure 1. Développement d'une boule de feu au voisinage de sa taille maximale (charge hémisphérique au sol ; images espacées de 1 ms). Les structures visibles à la surface sont le résultat d'instabilités liées au mélange turbulent entre gaz de détonation et air.

ment numériques et ne traduisent pas une réalité physique.

Certains codes toutefois traitent les mailles d'interface, contenant à la fois les produits de détonation et l'air, avec une méthode « chimie à vitesse infinie ». La méthode consiste à faire apparaître de manière instantanée (vitesse infinie) dans les mailles considérées un troisième matériau, les produits de combustion, selon la stœchiométrie et le bilan énergétique des réactions chimiques. Il s'agit toutefois d'un artifice numérique, puisque la zone de mélange utilisée n'est pas issue de l'interpénétration entre gaz réactifs et air ambiant.

La comparaison entre résultats numériques et expérimentaux montre malgré tout un accord correct entre signaux de pression mesurés et calculés (temps d'arrivée et pics de surpression), pour des capteurs situés à une distance suffisante de la charge. L'accord sur la dimension stabilisée de la boule de feu est nettement moins bon. De même, le temps d'arrivée et l'intensité du pic de pression secondaire sont mal restitués.

### Élaboration du modèle

La simulation numérique directe multi-D des instabilités réactives se heurte à des difficultés d'ordre pratique (perturbation initiale à l'interface), informatique (maillage assez fin pour capturer chaque instabilité) et numérique (résultat dépendant du code, même pour une instabilité unique [2]). De nombreuses approches réduites ont été décrites : modèles  $k-\varepsilon$ , multiphasiques, de perturbations linéaires... Les plus performantes contiennent un nombre considérable de paramètres [3] dont l'identification pose problème.

Nous avons développé un nouveau modèle qui appartient à la classe des modèles multiphasiques. Les détails de son élaboration sont donnés en [1]. Le modèle d'écoulement moyen a été étendu par un modèle d'interpénétration. L'étude de ce dernier, dans la limite d'une relaxation rapide des vitesses, aboutit à une description qui :

- ▶ contient un paramètre unique (similaire à une viscosité artificielle);
- ▶ respecte les conditions d'interface en l'absence d'interpénétration;
- ▶ préserve l'hyperbolicité des équations et la dynamique des ondes;
- ▶ est thermodynamiquement cohérente.

La réaction chimique est traitée par l'approche « chimie à vitesse infinie », mais avec une zone de mélange correctement calculée.

### Comparaison expériences / calcul

Des comparaisons expériences/calcul ont été menées sur le développement d'instabilités en tube à choc, dans les configurations léger/lourd et lourd/léger, ainsi que sur la détonation de charges sphériques. Seul ce dernier cas est illustré. Les expérimentations de charges de TNT et de HMX (octogène) menées au CEA - Gramat ont servi de référence. Les

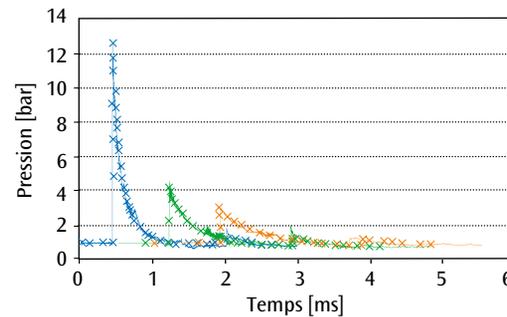


Figure 2. Comparaison expériences (traits) / calculs (x) pour les signaux de pression issus de la détonation en champ libre d'une charge sphérique de HMX de 708 g. Mesures de pression à 0,99 m (bleu); 1,59 m (vert) et 2,00 m (orange) du centre de la charge.

conditions initiales des calculs prennent en compte les profils de pression, densité et vitesse dans la charge.

Le modèle restitue correctement les temps d'arrivée et la forme générale des signaux de pression, que l'on active ou non la prise en compte de l'interpénétration et de la postcombustion, ce qui n'est pas surprenant au vu des résultats publiés avec d'autres codes. Ces seules comparaisons ne sont donc pas suffisantes pour juger de la qualité d'un modèle. Le nouveau modèle restitue par contre le temps d'arrivée et l'intensité du choc secondaire (figure 2), ce qui signifie que la dynamique des ondes dans la zone de mélange est bien modélisée. Le rapport  $R/R_0$  entre rayon maximal de la boule de feu et rayon initial de la charge pour le TNT vaut environ 24 expérimentalement, 17 pour le modèle sans interpénétration, et 22 pour le modèle complet. Pour le HMX, l'accord entre modèle complet et mesures est similaire.

### Conclusion

Le nouveau modèle a été comparé à des expériences différentes en termes de rapport de pressions entre milieu haute pression et milieu basse pression. Dans tous les cas, le calage d'un paramètre unique suffit à reproduire de manière satisfaisante les résultats expérimentaux.

Nos travaux actuels portent, d'une part, sur la détermination *a priori* de ce paramètre pour une configuration expérimentale donnée et, d'autre part, sur l'extension du modèle en 3D et son intégration dans la plateforme multiphasique CHYMERE, développé par RS2N et l'IUSTI au profit du CEA - Gramat. Enfin, des travaux supplémentaires sont prévus pour prendre en compte une phase solide dispersée afin, en particulier, de pouvoir simuler les explosifs aluminés et les charges à effets de souffle renforcé.

### Références

- [1] R. SAUREL, G. HUBER, G. JOURDAN, E. LAPÉBIE, L. MUNIER, "Modelling spherical explosions with turbulent mixing and post-detonation", *Phys. Fluids*, **24**(11), p. 115101-1–115101-42 (2012).
- [2] R. LISKA, B. WENDROFF, "Comparison of several difference schemes on 1D and 2D test problems for the Euler equations", *SIAM J. Sci. Comput.*, **25**(3), p. 995-1017 (2004).
- [3] B. CHENG, "Review of turbulent mixing models", *Acta Math. Sci.*, **29B**(6), p. 1703–1720 (2009).