

N° d'ordre : 3829

Université des Sciences et Technologies de Lille

THESE DE DOCTORAT

Spécialité

GENIE CIVIL

Sujet de thèse :

MODELISATION DES PHENOMENES D'ONDES EXPLOSIVES

Kamal MAHMADI

Soutenue le 04 juillet 2006 devant le jury composé de :

Président :	I. SHAHROUR, Professeur, Université des Sciences et Technologies de Lille
Rapporteur :	A. OUAHSINE, Professeur, Université de Technologie de Compiègne
Rapporteuse :	C. DJELAL DANTEC, Professeur, Université d'Artois, Béthune
Directeur de thèse :	M. SOULI, Professeur, Université des Sciences et Technologies de Lille
Examineur :	J. F. SIGRIST, Ingénieur de Recherche, DCN, La Montagne

« L'étude des matières explosives a quelque chose qui séduit l'imagination, et cela à un double point de vue : en raison de la puissance qu'elle met entre les mains de l'homme, et en raison des notions plus profondes qu'elle nous permet d'acquérir sur le jeu des forces naturelles, amenées à leur plus haut degré d'intensité »

M. BERTHELOT

sur la force des matières explosives d'après la thermochimie (1883)

A ma Famille

Remerciements

Mes remerciements s'adressent, en premier lieu, à Monsieur Mhamed Souli, Professeur à l'Université des Sciences et Technologies de Lille, qui a bien voulu encadrer ma thèse.

Madame Chafika Djelal Dantec, Professeur à l'Université d'Artois (Béthune) et Monsieur Abdellatif Ouahsine, Professeur à l'Université de Technologie de Compiègne m'ont fait l'honneur d'être rapporteurs de cette thèse. Je leur suis très reconnaissant d'avoir accepté cette tâche.

Je remercie très particulièrement Monsieur Isam Shahrour, Directeur du Laboratoire de Mécanique de Lille, et Monsieur Jean François Sigrist, Ingénieur de Recherche à la Direction de la Construction Navale, Service Technique et Scientifique DCN propulsion (La Montagne), qui ont eu l'amabilité de bien vouloir participer à mon jury.

Je remercie également mes amis et collègues de l'Ecole Polytechnique Universitaire de Lille et du Laboratoire de Mécanique de Lille.

Evidemment, mes remerciements les plus chaleureux à tous ceux qui m'ont soutenu.

Table des matières

Tables des matières	i
Index des figures	v
Index des tableaux	ix
1 Introduction Générale	1
2 Modélisation des détonations et état de l'art	6
2.1 Explosifs	7
2.2 Physique des détonations	9
2.2.1 Régime normal de la détonation	11
2.2.2 Théorie de Chapman-Jouguet (CJ)	12
2.2.3 Détermination du point CJ et de la courbe d'Hugoniot	15
2.3 Relations de saut de Rankine-Hugoniot	18
2.4 Equation d'état Jones-Wilkins-Lee (JWL)	22
2.5 Aperçu sur les hydrocodes	27
2.5.1 Hydrocodes Lagrangiens	27
2.5.2 Hydrocodes Eulériens	28
2.5.3 Hydrocodes Arbitraires Lagrange-Euler (ALE)	28
2.5.4 Hydrocodes de couplage Euler-Lagrange (CEL)	29
2.6 Méthode de la viscosité de choc	30
2.6.1 Viscosité de choc dans une dimension	31
2.6.1.1 Viscosité artificielle de von Neumann et Richtmyer	31
2.6.1.2 Viscosité artificielle de HEMP	33
2.6.2 Viscosité de choc dans deux dimensions	34
2.6.2.1 Extension standard	35
2.6.2.2 Viscosité de HEMP	36
2.7 Conclusion	37

3 Modélisation des détonations en utilisant la méthode Eulérienne multi-matériaux	39
3.1 Introduction	39
3.2 Méthode Lagrangienne	41
3.2.1 Forme forte	42
3.2.2 Forme faible	43
3.2.3 Méthode de la différence centrée	44
3.2.4 Contrôle du pas de temps	45
3.2.5 Calcul des forces aux nœuds	46
3.2.6 Etapes d'un pas Lagrangien	49
3.3 Méthode Eulérienne	49
3.3.1 Equations régissantes	49
3.3.2 Méthode split	53
3.3.2.1 Advection de la masse	54
3.3.2.2 Advection de la quantité de mouvement.....	54
3.3.3 Algorithmes d'advection	56
3.3.3.1 Algorithme de la cellule donneuse	56
3.3.3.2 Algorithme de Van Leer	57
3.4 Méthodes de suivi d'interface des surfaces	59
3.4.1 Méthode MAC	59
3.4.2 Méthode SLIC	60
3.4.3 Méthode VOF	60
3.5 Etude numérique de la détonation de l'explosif C-4 dans l'air	62
3.5.1 Résultats numériques en utilisant la méthode Lagrangienne	64
3.5.2 Résultats numériques en utilisant la méthode Eulérienne multi- matériaux	66
3.6 Modélisation d'une détonation avec réflexion d'onde de choc de l'explosif C-4 dans l'air en utilisant la méthode Eulérienne multi- matériaux	68
3.7 Etude numérique d'onde de choc produite par un cordeau détonant en forme spirale.....	71
3.7.1 Etude expérimentale	72
3.7.1.1 Conception de la forme spirale	73
3.7.1.2 Etude photographique et mesure de la pression	76
3.7.1.3 Résultats expérimentaux	78

3.7.2 Etude numérique	80
3.7.2.1 Modèles utilisés	80
3.7.2.2 Equation d'état Jones-Wilkins-Lee-Baker (JWL)	82
3.7.2.3 Equation d'état Mie-Grüneisen utilisée pour l'eau	83
3.7.2.4 Résultats numériques	84
3.8 Conclusion	90
4 Résolution numérique des détonations par la méthode ALE multi-matériaux et la nouvelle méthode de relaxation retardée des mailles introduite dans la méthode ALE multi-matériaux.....	91
4.1 Introduction	91
4.2 Equations régissantes de la méthode ALE	93
4.3 Algorithmes de lissage	94
4.3.1 Algorithme Equipotentiel	95
4.3.2 Algorithme de la moyenne simple	96
4.3.3 Algorithme de Kikuchi	97
4.3.4 Combinaison des algorithmes de lissage	97
4.4 Modélisation d'une détonation de l'explosif C-4 dans l'air en utilisant la formulation ALE multi-matériaux	98
4.5 Technique de relaxation retardée des mailles introduite dans la méthode ALE multi-matériaux	100
4.5.1 Phase Lagrangienne	100
4.5.2 Phase de relaxation des mailles	101
4.6 Modélisation d'une détonation de l'explosif C-4 dans l'air en utilisant la méthode de relaxation retardée des mailles	102
4.7 Modélisation d'une détonation de l'explosif PBX en utilisant la méthode de relaxation retardée des mailles	105
4.8 Modélisation d'une détonation avec réflexion de l'explosif C-4 en utilisant la méthode de relaxation retardée des mailles	106
4.9 Conclusion	109

5 Etude numérique d'une détonation forte : Interaction ondes de choc-structure	111
5.1 Introduction	111
5.2 Interaction ondes de choc-structure	112
5.3 Formulation Lagrangienne pour la structure	115
5.4 Modélisation des fluides	115
5.5 Etude expérimentale de la détonation forte	116
5.6 Etude numérique du phénomène de la détonation forte	118
5.7 Conclusion	129
6 Conclusion	130
Bibliographie	134
Annexe : Publications	144

- K. Mahmadi, S. Itoh, T. Hamada, N. Aquelet and M. Souli, **Numerical Studies of Wave Generation Using Spiral Detonating Cord**, MSF (Materials Science Forum), Vol. 465-466 (ISSN: 0255-5476), pp.439-444.
- K. Mahmadi, M. Souli, N. Aquelet, **Numerical Study of Overdriven Detonation Phenomenon**, PVP2005-71667, Emerging Technology in Fluids, Structures, and Fluid-Structure Interactions - 2005, July 17-21, 2005 Denver, Colorado.
- K. Mahmadi, N.Aquelet and M.Souli, **New Mesh Relaxation Technique in Multi-Material ALE Applications** , PVP-Vol.485-1, Emerging Technology in Fluids, Structures, and Fluid-Structure Interactions - 2004, Volume 1, July 25-29 2004, San Diego, California USA, pp135-140.
- K.Mahmadi, N.Aquelet and M.Souli, **High Impact Analysis using LS-DYNA**, PVP-Vol.460, Emerging Technology in Fluids, Structures, and Fluid-Structure Interactions - 2003, July 20-24 2003, Cleveland, Ohio USA, pp243-252.
- K.Mahmadi, N.Aquelet, M.Souli and J. Gabrys, **ALE Multi-Material Formulation of High Explosive Detonation Using LS-DYNA3D**,PVP-Vol.446-1, Emerging Technology in Fluids, Structures, and Fluid-Structure Interactions - 2002, Volume 1, August, 4-8 2002, Vancouver Canada, pp111-120.

Index des figures

2.1	: Détonation d'un bloc d'explosif.	10
2.2	: Forme d'une onde de détonation.	10
2.3	: Propagation d'onde d'un explosif.	12
2.4	: La ligne de Rayleigh et la courbe d'Hugoniot pour un explosif de $\rho_0=1.6\text{g/cm}^3$, et $p_1=25.6\text{GPa}$	15
2.5	: Principe des expériences de Deal.	16
2.6	: Courbe de la pression et de la vitesse des particules pour un explosif « Composition B » ...	18
2.7	: Conditions de saut.	20
2.8	: Forme adiabatique de l'équation d'état JWL de l'explosif C-4.	25
2.9	: Essai typique du cylindre [Merchant et al., 2002].	25
2.10	: Calcul de la longueur caractéristique de l'élément selon Wilkins.	37
3.1	: Expansion du gaz de l'explosif C-4 dans l'air à $t=100\mu\text{s}$	41
3.2	: Maillage initial et maillage décalé.	55
3.3	: Interfaces entre fluides dessinées par la méthode SLIC.	60
3.4	: Calcul des valeurs aux faces dans la méthode de Youngs.	61
3.5	: Fractions volumiques des faces voisines utilisées par la technique de Youngs.	61
3.6	: Interfaces entre des fluides tracées par la technique VOF de Youngs.	62
3.7	: Détonation de l'explosif C-4 dans l'air.	63
3.8a	: Maillage à $t=0\mu\text{s}$	64
3.8b	: Maillage Lagrangien à $t=300\mu\text{s}$	64
3.8c	: Maillage Lagrangien à $t=600\mu\text{s}$	65
3.9	: Courbes expérimentale et numérique obtenue en utilisant la formulation Lagrangienne de l'historique de la pression à 5 pieds de l'explosif.	65
3.10	: Modèle Eulérien utilisé.	66
3.11	: Expansion de la pression à $t=1500\mu\text{s}$	67
3.12	: Courbe de la surpression en fonction de la distance par rapport à l'explosif.	67
3.13	: Courbes expérimentale et numérique obtenue en utilisant la formulation Eulérienne multi-matériaux de l'historique de la pression à 5 pieds de l'explosif	68
3.14	: Détonation de l'explosif C-4 dans l'air dans le cas d'une réflexion d'onde.	68

3.15 : Modélisation d'une explosion de l'explosif C-4 dans l'air dans le cas d'un mur	69
3.16 : Courbes expérimentale et numérique obtenue en utilisant la formulation Eulérienne multi-matériaux de l'historique de la pression à 5 pieds de l'explosif dans le cas d'une réflexion d'onde de choc.	70
3.17 : Pression avant réflexion d'onde de choc (t=1ms)	71
3.18 : Pression après réflexion d'onde de choc (t=2ms)	71
3.19 : Modèle de la spirale.	73
3.20 : Schéma d'observation optique utilisée dans la photographie de balayage de fente	74
3.21 : Photographie de balayage de fente.	75
3.22 : Modèle de calcul.	75
3.23 : Outil d'observation optique.	77
3.24 : Outil de mesure de la pression.	77
3.25 : Photographie à images intégrales.	78
3.26 : Pressions maximales et impulsions.	79
3.27 : Modèle du cas 1, forme droite.	80
3.28 : Modèle du cas 2, forme spirale.	81
3.29 : Modèle du cas 3, forme spirale.	81
3.30 : Modèle du cas 4, forme circulaire.	82
3.31 : Convergence de l'onde de choc.	85
3.32 : Courbes numérique et expérimentale pression-temps à Dh=50mm, cas1.	85
3.33 : Profil de la pression à t=12 μ s, 24 μ s et 36 μ s.	86
3.34 : Courbes numérique et expérimentale pression-temps à Dh=50mm, cas2.	86
3.35 : Profil de pression à t=10 μ s, 20 μ s et 30 μ s.	87
3.36 : Courbes numérique et expérimentale pression-temps à Dh=50mm, cas3.	87
3.37 : Profil de pression à t=18 μ s, 36 μ s et 54 μ s.	88
3.38 : Courbes numérique et expérimentale pression-temps à Dh=50mm, cas4.	88
3.39 : Profil de la pression à t= 12 μ s, 24 μ s et 36 μ s.	89
4.1 : Déplacement des nœuds avec l'algorithme équipotentiel.	96
4.2 : Modèle ALE multi-matériaux à t=0 μ s.	98
4.3 : Modèle ALE multi-matériaux à t=1600 μ s.	98
4.4 : Propagation de la pression à t=1600 μ s en utilisant la méthode ALE multi-matériaux.	99
4.5 : Courbes expérimentale et numérique en utilisant la formulation ALE multi-matériaux de l'historique de la pression à 5 pieds de l'explosif.	99

4.6	: Courbes expérimentale et numérique en utilisant la formulation de relaxation retardée des mailles de l'historique de la pression à 5 pieds de l'explosif.....	103
4.7	: Détonation de l'explosif C-4 à $t=400 \mu\text{s}$	103
4.8	: Courbe de la surpression en fonction du paramètre de relaxation η	104
4.9	: Propagation de la pression à $t=1800\mu\text{s}$ en utilisant la méthode de relaxation retardée des mailles.	104
4.10	: Courbes expérimentale et numérique en utilisant la formulation de relaxation retardée des mailles de l'historique de la pression à 5 pieds de l'explosif.....	106
4.11	: Courbe de la surpression en fonction du paramètre de relaxation η dans le cas de la détonation de l'explosif PBX	106
4.12	: Détonation de l'explosif C-4 dans le cas avec mur à $t=1000\mu\text{s}$ en utilisant la méthode de relaxation retardée des mailles.....	107
4.13	: Détonation de l'explosif C-4 dans le cas avec réflexion de l'onde à $t=2000\mu\text{s}$ en utilisant la méthode de relaxation retardée des mailles.	108
4.14	: Courbes expérimentale et numérique en utilisant la formulation ALE multi-matériaux de l'historique de la pression à 5 pieds de l'explosif.....	108
4.15	: Courbe de la surpression en fonction du paramètre de relaxation η	109
5.1	: Couplage en pénalité.....	114
5.2	: Dispositif de l'expérience.....	116
5.3	: Méthode optique	117
5.4	: Modélisation du phénomène de la détonation forte	118
5.5	: Modèle d'éléments finis du cas 1	119
5.6	: Plaque métallique à $t=0\mu\text{s}$ et $t=5\mu\text{s}$ pour le cas 1	120
5.7	: Propagation de la pression dans l'explosif donneur à $t=1\mu\text{s}$ et $t=2\mu\text{s}$ pour le cas1.....	120
5.8	: Propagation de la pression dans l'explosif accepteur à $t=4\mu\text{s}$ et $t=5\mu\text{s}$ pour le cas 1.....	121
5.9	: Historique de la pression de deux éléments distants de 15mm pour le cas 1	121
5.10	: Modèle d'éléments finis du cas 2.....	122
5.11	: Plaque métallique à $t=0\mu\text{s}$ et $t=5\mu\text{s}$ dans le cas 2	122
5.12	: Propagation de la pression dans l'explosif donneur à $t=1\mu\text{s}$ et $t=2\mu\text{s}$ pour le cas 2.....	123
5.13	: Propagation de la pression dans l'explosif accepteur à $t=5\mu\text{s}$ et $t=6\mu\text{s}$ pour le cas 2.....	123
5.14	: Historique de la pression de deux éléments distants de 15 mm pour le cas 2	124
5.15	: Modèle d'éléments finis du cas 3.....	124
5.16	: Plaque métallique à $t=0\mu\text{s}$ et $t=5\mu\text{s}$ pour le cas 3	125
5.17	: Propagation de la pression dans l'explosif donneur à $t=1\mu\text{s}$ et $t=2\mu\text{s}$ pour le cas 3.....	125
5.18	: Propagation de la pression dans l'explosif accepteur à $t=5\mu\text{s}$ et $t=6\mu\text{s}$ pour le cas 3.....	126

5.19: Historique de la pression de deux éléments distants de 15mm pour le cas 3	126
5.20: Modèle d'éléments finis du cas 4	127
5.21: Plaque métallique à $t=0\mu\text{s}$ et $t=4\mu\text{s}$ pour le cas 4	127
5.22: Propagation de la pression dans l'explosif donneur à $t=1\mu\text{s}$ et $t=2\mu\text{s}$ pour le cas 4.....	128
5.23: Propagation de la pression dans l'explosif accepteur à $t=4\mu\text{s}$ et $t=5\mu\text{s}$ pour le cas 4.....	128
5.24: Historique de la pression de deux éléments distants de 15mm pour le cas 4	129

Index des tableaux

3.1	: Différents cas du cordeau détonant étudié.....	79
3.2	: Paramètres JWL de cordeau détonant.....	83
3.3	: Paramètres de Grüneisen pour l'eau.....	84
3.4	: Tableau récapitulatif des résultats numériques et expérimentaux du cordeau détonant.....	89
4.1	: Paramètres JWL de l'explosif PBX.....	105
5.1	: Résultats expérimentaux des vitesses de détonation.....	117
5.2	: Tableau récapitulatif des résultats numériques et expérimentaux du phénomène O.D.D.....	129

Chapitre 1

Introduction Générale

Préambule

Les modélisations mathématiques et les simulations numériques sont devenues essentielles pour le développement de la réponse du comportement mécanique de plusieurs produits industriels. Dans la plupart des secteurs de l'ingénierie, un grand nombre de problèmes physiques s'exprime sous forme d'équations aux dérivées partielles. Ces équations sont fondamentales pour la modélisation des phénomènes physiques puisqu'il n'existe pas d'outils analytiques pour résoudre les problèmes non linéaires. Les chercheurs sont alors amenés à utiliser des techniques numériques pour obtenir des solutions approchées.

Les simulations numériques évitent la lourdeur d'un recours systématique aux essais qui ont souvent un coût très élevé. Parmi les techniques utilisées, on peut citer la méthode des éléments finis, la méthode des différences finies et la méthode des volumes finis. Ces méthodes sont utilisées pour résoudre une large variété de problèmes transitoires non-linéaires rencontrés dans l'industrie. La méthode des éléments finis a été appliquée depuis la fin des années 40 pour résoudre plusieurs problèmes tels que le transfert de chaleur, et la réponse des structures mécaniques sous chargement. Aujourd'hui, la méthode est largement employée. Son succès s'explique par la facilité de sa mise en oeuvre pour la résolution d'une grande variété de problèmes. Parmi les applications industrielles les plus courantes, cette méthode permet de résoudre des problèmes de dynamique rapide non-linéaire (impact, crash, collision, détonation, etc.).

Introduction

Bien que les explosifs soient connus depuis plus de mille ans, la science des explosifs est encore jeune. Des études se sont intéressées à l'interaction non-linéaire entre la chimie et la mécanique des fluides, qui produit le dégagement rapide de l'énergie connu sous le nom de détonation [Davis, 1981]. La raison majeure pour laquelle la science des explosifs est relativement peu développée est l'extrême difficulté des mesures à l'intérieur d'un explosif lors d'une détonation. Pourtant, l'étude de l'effet des détonations est primordiale pour la sécurité (bâtiments, avions, etc.). De même, les systèmes explosifs sont devenus de plus en plus demandés dans plusieurs domaines industriels. Pour ces raisons, des calculs numériques sont nécessaires pour prédire les comportements des explosifs. La recherche expérimentale dans ce domaine fournit de vraies données. Cependant, les expériences sont souvent chères, consommatrices de temps, et peuvent être limitées par la praticabilité technique. En revanche, la simulation numérique, si elle est suffisamment précise et fiable, peut s'avérer une excellente solution, aussi permet-elle d'éviter des essais réels coûteux.

Plusieurs questions se posent lors de la modélisation des problèmes de détonations : Quelle méthode choisit-on pour chaque cas : détonation dans l'air, détonation dans l'eau, détonation forte (Overdriven detonation), etc. ? Peut-on appliquer des méthodes d'adaptation de maillage, et quelles sont leurs limites ? Quelle méthode peut-on utiliser pour modéliser des problèmes d'interaction ondes de choc - structure ?

Cette thèse est consacrée à la modélisation des phénomènes transitoires rapides de la propagation d'ondes explosives, en utilisant le code de calculs par éléments finis LS-DYNA. Les résultats numériques obtenus seront comparés aux résultats expérimentaux afin de permettre une bonne analyse des modèles et les méthodes utilisés pour différents problèmes de détonation.

Le mémoire est articulé en six chapitres :

Dans le second chapitre, la physique de la détonation et les conditions de saut de Rankine-Hugoniot seront évoquées. L'équation d'état Jones-Wilkins-Lee (JWL) sera développée. Ensuite, un aperçu des méthodes et des hydrocodes employés pour les problèmes de propagation d'ondes explosives sera présenté. Enfin, la méthode de viscosité artificielle conçue pour la capture des chocs sera détaillée.

Le troisième chapitre sera consacré à l'utilisation de la méthode Eulérienne multi-matériaux pour résoudre des phénomènes de propagation d'ondes de choc. Dans le premier modèle, une étude de la simulation de la détonation de l'explosif C-4 dans l'air sera réalisée. L'objectif sera de chercher numériquement l'historique de la pression à 5 pieds (152.4cm) du centre de l'explosif, et de comparer ces résultats avec des résultats expérimentaux réalisés par le groupe « McDonnell Douglas Corporation », spécialisé dans le domaine aérospatial. Pour modéliser ce phénomène, nous avons utilisé plusieurs méthodes numériques afin de trouver la méthode (ou les méthodes) qui donne les meilleurs résultats en les comparant avec des résultats expérimentaux. Au début, la méthode Lagrangienne, où le maillage se déforme avec le matériau de manière à ce qu'une particule du matériau initialement présente dans une maille reste dans cette maille au cours du temps, sera utilisée. Cette approche est limitée par de grandes distorsions des mailles. Par conséquent, la précision des résultats diminue nettement. La méthode Eulérienne multi-matériaux, où les mailles restent fixes, et où chaque maille peut contenir deux ou plusieurs matériaux, élimine les grandes distorsions liées au maillage Lagrangien. Cependant, les coûts CPU des calculs Eulériens liés à la phase d'advection sont chers, et des erreurs numériques (problème de dissipation, etc.) peuvent exister. L'application de cette méthode pour modéliser l'explosion du C-4 dans l'air donnera l'historique de la pression à 5 pieds du centre de l'explosif. Ce résultat numérique sera comparé au résultat expérimental.

Dans le second modèle, la présence d'un mur de blocage placé à 4 pieds (121.92cm) du centre de l'explosif C-4 conduit à une réflexion d'ondes de choc. Le résultat expérimental de l'historique de la pression à 5 pieds de

l'explosif, fourni par la compagnie Boeing, montre la présence de deux pics de pression. Le premier correspond à la propagation directe du front de choc, le second est lié à la réflexion d'ondes de choc à travers le mur. Afin de modéliser cette application, nous avons utilisé deux méthodes. La première est la méthode Eulérienne multi-matériaux, où un grand nombre d'éléments sera utilisé afin d'avoir des mailles fines. C'est la raison pour laquelle, la méthode de relaxation retardée des mailles introduite dans la formulation ALE multi-matériaux (*présentée dans le chapitre 4*) a été appliquée. Cette méthode permet de raffiner le maillage dans la région du front de choc, permettant ainsi d'utiliser un nombre inférieur de mailles. La troisième étude est consacrée à l'explosion du cordeau détonant en forme de droite, cercle, et spirale. L'étude expérimentale a été réalisée par Itoh et al. [Itoh et al., 2000]. Les objectifs de cette étude sont de montrer d'une part la capacité de modéliser différentes formes de l'explosif, d'autre part que l'utilisation des formes spirales permet la convergence de la pression, et donne à l'explosif une pression plus élevée que la pression de Chapman-Jouguet (CJ). Cette propriété est très attractive pour plusieurs domaines industriels tels que la stérilisation non-thermique de la nourriture [Fujiwara et al., 2003], et l'utilisation de plus en plus des alliages d'aluminium au lieu de l'acier dans l'industrie d'automobiles [Iyama et al., 2004]. Notre investigation numérique permettra de simuler ce phénomène, et de montrer numériquement que les ondes explosives du cordeau détonant sous forme spirale convergent, et donnent une pression plus importante que la pression de Chapman-Jouguet.

Dans le quatrième chapitre, la méthode utilisée est la méthode Arbitraire Lagrange-Euler (ALE) qui présente une solution intermédiaire entre les méthodes Lagrangiennes et Eulériennes. Les mailles ne sont pas fixes et ont un mouvement libre et indépendant de la dynamique du matériau évitant ainsi plusieurs inconvénients liées aux deux précédentes méthodes. Cependant, pour les problèmes de dynamique rapide, cette méthode ne permet pas d'avoir des mailles très fines près de l'onde de choc, ce qui diminue la précision des résultats. Une nouvelle méthode de relaxation retardée des mailles introduite dans la méthode ALE multi-matériaux sera testée. Cette méthode adaptative permet de raffiner les mailles à proximité du front de choc. Elle est appropriée à ce genre de problèmes, et permet

d'avoir une précision nettement meilleure. Cependant, la précision de cette méthode est liée au choix de la valeur d'un paramètre de relaxation (η) qui doit être défini d'une manière générale. L'application de cette méthode à la détonation (sans et avec mur) de l'explosif C-4 dans l'air nous permettra, en se référant aux résultats expérimentaux, de comprendre la manière avec laquelle le paramètre de relaxation η influence la valeur de la surpression, et de montrer comment choisir la valeur de ce paramètre. L'application de cette méthode pour la détonation d'un autre type d'explosif (PBX) permettra de vérifier si le paramètre de relaxation influence les résultats de la même façon, i.e. obtient-on un comportement quasi Eulérien quand ce paramètre est supérieur à $0.1 \text{ } (\mu\text{s}^{-1})$, et un maillage quasi Lagrangien à proximité du front de choc quand le paramètre de relaxation est proche de $0 \text{ } (\mu\text{s}^{-1})$?

Dans le cinquième chapitre, la modélisation du phénomène d'une détonation forte (Overdriven detonation) sera réalisée. Le principe de ce phénomène est de détonner un explosif de type PBX qui pousse, avec une grande vitesse, une plaque d'aluminium qui percute un second explosif du même type (PBX). Cela permet de donner au second explosif une vitesse de détonation supérieure à la vitesse de Chapman-Jouguet. La modélisation de ce problème d'interaction fluide-structure s'appuie sur un couplage Euler-Lagrange. D'une manière générale, ce couplage permet de traiter une structure mobile rigide ou déformable qui est dans ce cas la plaque d'aluminium (modélisée par une formulation Lagrangienne), et un fluide liquide ou gazeux, en écoulement autour ou contre une partie de la structure (modélisée par une formulation ALE ou Eulérienne). Dans notre cas, ce sont l'air et les deux explosifs de type PBX. Dans cette application, la vitesse de la plaque dépend de la force de l'explosif donneur, et la performance de l'explosif récepteur dépend de la force d'impact de la plaque. Les résultats numériques obtenus seront comparés aux résultats expérimentaux réalisés par Itoh et al. [Itoh et al., 2002].

Cette étude s'achèvera sur un rappel des conclusions auxquelles nous sommes parvenus.

Chapitre 2

Modélisation des détonations et état de l'art

Le mécanisme de la détonation des matériaux explosifs est très complexe et mal compris, et la modélisation du comportement et des effets d'ondes de détonation est relativement jeune [Davis, 1981]. En absence d'une théorie dynamique complète de la détonation, sa modélisation s'est concentrée sur deux phénomènes primaires liés à la détonation. Le premier est la dynamique de choc de la détonation, qui décrit la propagation du choc principal qui transmet une onde de choc dans les matériaux adjacents. Le second est l'équation d'état des produits explosifs. L'image la plus simple du processus de détonation est celle d'une onde de choc rapide dans laquelle il y a conversion instantanée de l'énergie chimique en énergie thermique et cinétique des produits gazeux au front de choc. L'analyse d'ondes de choc de ce phénomène a comme résultat un modèle qui prédit un procédé de stabilité d'ondes de détonation connu sous le nom de processus de Chapman-Jouguet. La performance d'un explosif est déterminée par l'expansion des gaz après la fin de la réaction chimique de l'explosif. Ainsi, pour la calculer, on doit connaître l'état des matériaux (pression et vitesse des particules) à la fin de la zone de réaction, et leurs équations d'état, c.-à-d. comment la pression change t-elle en fonction de la vitesse des particules du gaz pendant l'expansion ?

Sans mesures directes de ces propriétés des matériaux, ni théorie fondamentale, comment procède t-on ? La pratique courante est d'appliquer la théorie de Chapman-Jouguet. Chapman et Jouguet étaient les premiers à présenter un modèle simple de dynamique des fluides des détonations décrivant une onde de choc supersonique se propageant avec une vitesse unique. Dans ce chapitre, nous évoquons la physique des détonations, les relations Rankine-Hugoniot qui expriment la conservation

de la masse, de la quantité de mouvement, et de l'énergie à travers un choc, l'équation d'état nécessaire pour la modélisation d'une détonation, les différents hydrocodes utilisés, et la méthode de viscosité de choc utilisée par la plupart des hydrocodes pour remédier aux problèmes d'oscillations numériques liées au traitement des chocs.

2.1 Explosifs

Un explosif est tout solide, liquide, ou gaz qui subit une réaction chimique rapide, et se convertit en phase gazeuse lorsqu'il est soumis aux stimulations tels que le choc ou la chaleur. C'est une substance capable de libérer rapidement une grande énergie accompagnée en général de la production d'une masse gazeuse importante.

Il existe les explosifs déflagrants et les explosifs détonants, selon les vitesses de détonation avec lesquelles la réaction chimique a lieu. Les explosifs déflagrants changent relativement lentement d'un état solide à un état gazeux. L'effet qui se produit dans les explosifs déflagrants quand ils sont amorcés s'appelle la déflagration. Les explosifs détonants subissent une détonation dès qu'ils sont amorcés. Cette détonation est une réaction chimique presque instantanée à une vitesse qui varie selon le type d'explosif. Les explosifs détonants sont caractérisés par la rapidité extrême avec laquelle la réaction chimique se produit. Le régime de déflagration est obtenu par une excitation peu énergétique, alors que le régime de détonation n'est obtenu qu'avec une excitation énergétique qu'on appelle amorçage qui s'effectue principalement par une onde de choc dont le saut de la pression est supérieur à un certain seuil. Pour franchir ce seuil, on fait généralement appel à un détonateur constitué d'une faible charge d'explosif sensibilisée qu'on amorce à l'aide d'une décharge électrique à travers un fil. Lorsque le fil se vaporise, il crée une onde de choc qui amorce l'explosif sensible. Il est également possible d'amorcer un explosif par l'impact d'un projectile ou un rayonnement Laser. Il existe aussi le choc inerte, où l'onde se propage en n'entraînant ni détonation ni déflagration.

Les explosifs détonants comme le TNT, le C-4, le PBX et le RDX sont utilisés dans plusieurs domaines industriels. Le TNT (ou trinitrotoluène) est très puissant. Il fond à 82°C, mais il n'explose qu'à 240°. Cela laisse une large marge de sécurité pour le couler et s'en servir comme ciment pour d'autres composés explosifs. Il est extrêmement stable, résistant au choc et à la chaleur. Cette stabilité diminue ses qualités comme étant explosif. En le combinant avec des explosifs plus détonants tel que le RDX dans des mélanges du genre cyclotol (60% RDX - 40% TNT, aussi appelé : Composition B), sa brisance augmente considérablement. Le PETN (Penta Erythritol Tetra Nitrate) est un des explosifs détonants les plus forts. Il est plus sensible au choc ou au frottement que le TNT. Il est utilisé comme explosif détonant, noyau explosif des cordeaux détonants ou comme composé d'autres explosifs détonants.

D'une manière générale, les effets d'une explosion dépendent d'un certain nombre de facteurs comme la pression maximale, et la durée d'interaction de l'onde de choc avec la structure. Plusieurs études des explosions sous-marines ont été réalisées. Swisdak [Swisdak, 1978] a compilé une grande quantité d'informations expérimentales dans un rapport afin de déterminer les relations entre la pression maximale, l'impulsion, le temps, l'énergie et le poids de différents explosifs. Mader [Mader, 1979] a réalisé la modélisation numérique du processus de détonation pour les explosifs condensés. Plusieurs modélisations numériques des détonations ont été réalisées dans le but de remplacer les expériences par des calculs numériques. Ainsi dans le domaine aéronautique, plusieurs modélisations ont été réalisées pour des raisons de sécurité aérienne. On peut citer les simulations des dommages des structures [Sanai et al., 1995]. Plusieurs autres modélisations ont tenté de prédire simultanément le comportement de l'onde de détonation et les dommages des structures [Ashley, 1992], [Bharatram, 1995], [Chen, 1997]. Quelques simulations numériques ont également été effectuées pour modéliser des ondes de détonation à l'intérieur d'un avion [Baum et al., 1993].

2.2 Physique des détonations

La détonation est causée par la réaction extrêmement rapide de l'explosif. C'est un phénomène qui soumet la matière qu'elle soit en phase gazeuse ou condensée à des pressions et des températures excessivement élevées capables de causer des dommages. Les ondes de détonation ont été observées expérimentalement il y a plus de 100 ans quand Mallard, Le Chatelier, Berthelot et Vieille ont découvert que des flammes de basse vitesse, se propageant dans un mélange gazeux réactif, pourraient soudainement acquérir des vitesses très élevées accompagnées d'augmentations de la température [Odiot, 2003].

Les deux caractéristiques principales d'une détonation sont : la vitesse de propagation est constante et régulière, et une crête dans la pression appelée « surpression » est observée au front de la détonation. Quand l'onde de choc est amorcée, elle ne s'arrête qu'après que la réaction soit quasi complète (cf. figure 2.1). L'onde de choc se propage dans l'air ou l'eau, en s'amortissant plus ou moins rapidement, parce qu'elle perd rapidement son énergie. L'onde de détonation se propage avec une vitesse supersonique. Par exemple, pour un explosif HMX d'une densité de $1,891 \text{ g/cm}^3$, sa vitesse de détonation est de 9110 m/s alors que sa vitesse du son est de l'ordre de 2700 m/s [cours de M. Pelestor]. La vitesse d'onde change selon l'explosif, dépendant principalement de sa composition et sa densité. Puisque la vitesse d'onde de détonation est plus rapide que la vitesse du son dans l'explosif, le matériau devant l'onde est absolument inchangé jusqu'à ce que l'onde de détonation le traverse.

L'onde de choc provoque par son passage des discontinuités de la vitesse, de la pression, de la masse volumique, et déclenche, via les pressions et les températures élevées qu'elle produit, des réactions presque instantanées de décomposition des molécules explosives initiales en un ensemble d'autres molécules, à l'état gazeux. Ces gaz s'appellent les produits de détonation, et se développent sur une certaine distance derrière le choc, jusqu'à la totale consommation de l'explosif solide, c'est la zone de réaction [cours de M. Pelestor]. Ensuite les gaz se détendent jusqu'à ce qu'ils atteignent une pression limite (cf. figure 2.2).

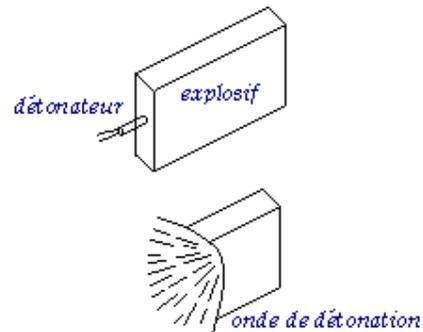


Figure 2.1 : Détonation d'un bloc d'explosif

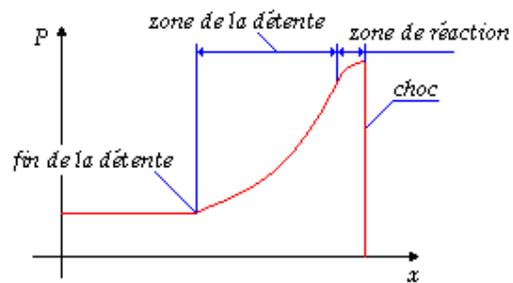


Figure 2.2 : Forme d'une onde de détonation

C'est la libération d'énergie qui assure la propagation d'onde. En général, une onde se propage à une vitesse constante appelée la vitesse de détonation qui est une des caractéristiques de l'explosif. Elle est quasiment insensible au milieu extérieur de l'explosif. Plusieurs régimes de détonations existent : Le régime d'établissement qui est la phase transitoire entre l'initiation et la stabilisation en régime courant. Dans ce régime, la vitesse de détonation est légèrement inférieure à celle du régime normal. Le

régime normal, c'est celui que prend la substance quand le phénomène de la détonation se propage sans aucune contrainte. Dans ce régime, la vitesse de détonation est constante. Le régime fort (ou la détonation forte) permet à la vitesse d'onde de devenir plus rapide qu'en régime normal. Ce régime est obtenu si par exemple on contraint l'onde à prendre une certaine forme, par exemple spirale convergente (*cf. section 3.7*).

2.2.1 Régime normal de la détonation

Ce régime est obtenu quand un explosif est amorcé en un point. Le phénomène se propage dans tout l'explosif. L'onde explosive obéit à la condition de Chapman-Jouguet. Elle a une vitesse de détonation constante D , et elle est convexe puisque le centre de courbure est dans les produits de détonation. La condition de Chapman Jouguet est déduite de l'expérience lorsque l'onde n'est pas perturbée par les perturbations derrière le choc. La vitesse de détonation D doit alors être au moins égale à la vitesse des perturbations qui pourraient la rattraper et modifier ainsi son état de détonation [*cours de M. Pelestor*]. Ces perturbations se propagent à la vitesse du son c dans un milieu de vitesse matérielle u . On a :

$$D \geq c + u \quad (2.1)$$

Jouguet a fait l'hypothèse que ces deux vitesses étaient égales. La condition de Chapman-Jouguet permet d'expliquer la stabilité de la célérité de l'onde explosive. L'onde de détonation peut être sphérique divergente. Elle se produit quand l'amorçage se situe à l'intérieur d'un explosif, par exemple au centre d'une sphère comme le cas de la détonation de l'explosif C-4 dans l'air (*cf. section 3.5*). Le front d'onde prend une forme sphérique dès les premiers millimètres et reste sphérique pendant la propagation d'onde. La vitesse de détonation tend vers la célérité idéale D_{cj} . Toutes les caractéristiques (ρ , p , u , ...) dépendent de $z = r/t$, où r est le rayon et t est le temps.

2.2.2 Théorie de Chapman-Jouguet (CJ)

La théorie de Chapman-Jouguet traite l'onde de détonation comme une discontinuité [Fickett and Davis, 1979]. Elle suppose que toute l'énergie chimique est libérée au front de la détonation, ainsi la zone de réaction est supposée avoir une épaisseur nulle. L'onde de détonation est ainsi rapprochée par une onde supersonique traversant l'explosif à une vitesse constante. La pression de Chapman-Jouguet est définie dans le cadre de la théorie de Chapman-Jouguet dont les principales hypothèses sont : l'équilibre thermodynamique des produits de détonation, et la consommation totale des produits explosifs. Même si en réalité, certains composants de l'explosif réagissent tardivement, l'approche Chapman-Jouguet reste une approche assez suffisante pour les problèmes de la détonation.

Soit un tube d'aire A traversé par une onde de vitesse U . Sur la figure (2.3), u est la vitesse des particules, p la pression, ρ la densité et E l'énergie interne spécifique. Les indices 0 et 1 indiquent respectivement les régions avant et après le passage du choc. Durant la période t , l'onde traverse une masse du matériau égale à $\rho_0 A U t$. En même temps, l'élément fluide se situant au front de l'onde traverse une distance $u_1 t$. Donc, le matériau traversé par le front d'onde a un volume égal à $A (U t - u_1 t)$, et sa masse est $\rho_1 A (U - u_1) t$. Sa quantité ne change pas [Davis, 1981]. On obtient :

$$\rho_0 U = \rho_1 (U - u_1) \quad (2.2)$$

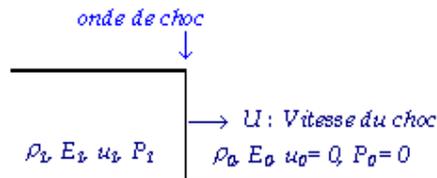


Figure 2.3 : Propagation d'onde d'un explosif

Le matériau traversé par l'onde est accéléré par une vitesse u_1 , la quantité de mouvement passe de zéro à $\rho_0 A U t u_1$. La force agissant sur le matériau est $p_1 A$. Puisque cette force agit au temps t , l'impulsion est $p_1 A t$. En égalisant le changement de la quantité de mouvement et l'impulsion, et en éliminant $A t$, on obtient :

$$p_1 = \rho_0 U u_1 \quad (2.3)$$

L'énergie interne change de $\rho_0 A U t (E_1 - E_0)$, l'énergie cinétique change de $1/2 \rho_0 A U t u_1^2$, et le travail effectué sur le matériau est le produit de la force et de la distance, $p_1 A t u_1$. Le changement de l'énergie et le travail effectué sont égaux. En éliminant $A t$, et en divisant par $\rho_0 U$, on obtient :

$$E_1 - E_0 = \frac{1}{2} u_1^2 \quad (2.4)$$

Les équations (2.2), (2.3) et (2.4) sont appelées les relations de Rankine-Hugoniot, ou les conditions de saut. Ce sont des relations qui expriment la conservation de la masse, de la quantité de mouvement, et de l'énergie à travers un choc. Ces relations sont développées dans la section (2.3). Bien qu'on n'ait pas une équation d'état théorique pour le matériau choqué, on sait empiriquement que le rapport entre la pression p et la vitesse des particules u est décrit d'une façon juste sur la courbe d'Hugoniot par quelques termes de l'équation (2.5).

$$p_1 = \rho_0 \left(c u_1 + s u_1^2 + \dots \right) \quad (2.5)$$

où c , s et les coefficients de puissances plus élevées de u , sont des constantes qui sont déterminées expérimentalement. La comparaison avec

l'équation (2.3) montre que la vitesse de l'onde de choc dans le matériau est donnée ainsi par l'équation (2.6) :

$$U = c + su_1 + \dots \quad (2.6)$$

Pour une vitesse d'onde de choc U fixe, l'équation (2.3) décrit une ligne dans le plan p - u , appelée la ligne de Rayleigh, le long de laquelle la quantité de mouvement est conservée. La pente de la ligne est donnée par le produit de U et la densité initiale ρ_0 . Sur la figure (2.3), le matériau à droite est l'explosif à l'état initial, et les matériaux à gauche sont les produits de l'explosion à l'état final. Les conditions de saut s'appliquent comme pour les ondes de choc, mais la relation d'Hugoniot décrivant l'état final des produits de l'explosion derrière le front d'onde a un terme additionnel reflétant le fait que l'énergie est perdue. La relation d'Hugoniot devient :

$$p_1 = \rho_0 (nQ + cu_1 + su_1^2 + \dots) \quad (2.7)$$

où Q est l'énergie chimique spécifique de l'explosif, et n est une constante du matériau, déterminée expérimentalement.

La figure (2.4) montre la courbe d'Hugoniot pour un explosif de $\rho_0 = 1.6 \text{ g/cm}^3$, et $p_1 = 25.6 \text{ GPa}$, et la ligne de Rayleigh tracée pour une vitesse de détonation de $8 \text{ mm}/\mu\text{s}$ [Davis, 1981]. L'intersection des deux courbes donne l'état du matériau derrière le front d'onde, c'est le point CJ. L'explosif a une vitesse de détonation minimale, et pour toute vitesse plus grande, la ligne de Rayleigh et la courbe d'Hugoniot ont deux points d'intersection. Par conséquent, l'état final de l'explosif choqué n'est pas déterminé uniquement par les conditions de saut et l'équation d'état.

Vers la fin de l'année 1890, Chapman et Jouguet ont éliminé cette ambiguïté. Ils ont étudié la propagation d'ondes qui pourraient suivre un

front de détonation, et ils ont montré qu'une détonation avance avec la vitesse de détonation minimale, qui est l'unique vitesse donnée par la ligne de Rayleigh tangente à la courbe d'Hugoniot.

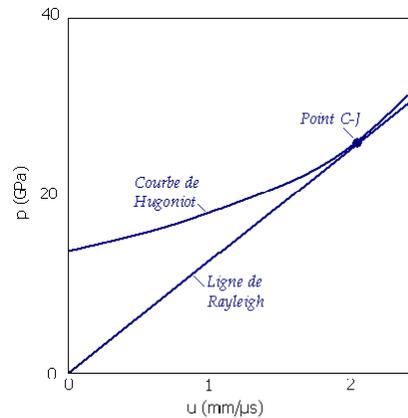


Figure 2.4 : La ligne de Rayleigh et la courbe d'Hugoniot pour un explosif de $\rho_0=1.6\text{g/cm}^3$, et $p_1=25.6\text{GPa}$ [Davis, 1981]

2.2.3 Détermination du point CJ et de la courbe d'Hugoniot

Le point CJ est déterminé en mesurant la vitesse de détonation, et la courbe d'Hugoniot pour un explosif donné. Pendant les années 50, Deal a effectué un vaste programme expérimental pour déterminer les courbes d'Hugoniot [les constantes dans l'équation (2.7)] pour plusieurs explosifs [Davis, 1981]. Il a simplifié l'analyse en utilisant les ondes de détonation planes dans les expériences. La figure (2.5) montre le principe des expériences de Deal.

L'onde de détonation plane atteint le matériau inerte, et mène une onde de choc plane à travers le matériau inerte. La surface libre du matériau inerte

se déplace vers le haut, en dirigeant le support contre le plexiglas. L'argon se comprime dans l'espace et se chauffe pour produire un bref flash de lumière. La surface libre se déplace seulement d'une distance très courte pour combler les deux espaces qui se trouvent à droite et à gauche, et elle se déplace d'une distance supplémentaire d pour combler l'espace central. Les expériences sont enregistrés par une caméra à balayage de fente. La mesure de la différence de temps entre le flash de l'espace central et le flash des deux espaces (à droite et à gauche) donne le temps que la surface libre prend pour se déplacer de la distance d . La division de la distance par le temps donne la vitesse de la surface libre. Mais, comment les mesures de la vitesse de la surface libre du matériau inerte déterminent-elles le point CJ, et la courbe d'Hugoniot dans l'explosif ?

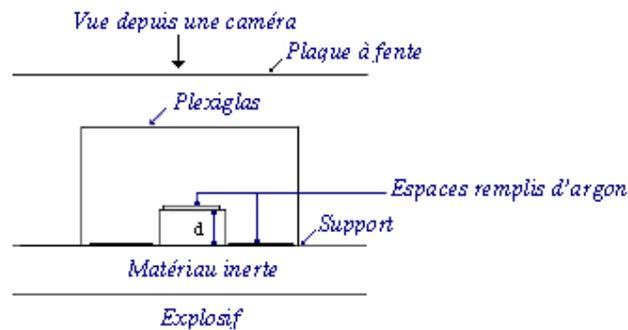


Figure 2.5 : Principe des expériences de Deal

L'analyse permet de déterminer la pression et la vitesse des particules du matériau inerte à son interface avec l'explosif. Deal a réalisé une série d'expériences avec des épaisseurs planes de plus en plus minces du matériau inerte, et il a utilisé les résultats pour déterminer la vitesse de la surface libre d'une épaisseur nulle en traçant une droite reliant les différents points dans la courbe de la vitesse de la surface libre en fonction de l'épaisseur du matériau inerte [Davis, 1981]. A partir de cette vitesse, il a calculé la vitesse des particules dans le matériau inerte à l'interface à l'instant où l'onde de choc a été transmise de l'explosif au matériau inerte. La vitesse des particules et la courbe d'Hugoniot déterminent la pression

dans le matériau inerte à l'instant de la transmission de l'onde de choc de l'explosif au matériau inerte. La pression et la vitesse des particules déterminées pour le matériau inerte à l'interface doivent être identiques à celles dans les produits de l'explosion. Ainsi, ces valeurs décrivent un point sur le diagramme $p-u$ pour les produits explosifs. C'est le point CJ de l'explosif si les propriétés du matériau inerte et de l'explosif sont exactement équivalentes. En pratique, ils ne le sont pas. Si le matériau inerte est plus dense que l'explosif, il reflète une onde de choc dans l'explosif; l'onde de choc éloigne l'explosif de l'état CJ. Si le matériau inerte est moins dense, une onde de raréfaction va de nouveau dans l'explosif, éloignant aussi l'explosif de l'état CJ. Ainsi, la vitesse des particules et la pression déterminées expérimentalement pour le matériau inerte décrivent un état possible pour l'explosif. D'autres états possibles sont déterminés en répétant les expériences de la plaque avec d'autres matériaux inertes plus et moins denses que l'explosif. La figure (2.6) montre les résultats expérimentaux pour plusieurs matériaux. La courbe lisse à travers ces points doit passer par le point CJ de l'explosif. Ce point est l'intersection de la courbe lisse avec la ligne de Rayleigh déterminée en mesurant la vitesse de détonation de l'explosif.

La courbe mesurée sur la figure (2.6) [Davis, 1981] diffère légèrement de la relation d'Hugoniot définie par l'équation (2.7). Cependant, on peut utiliser la courbe mesurée pour déterminer les coefficients de cette équation. Cette méthode pour déterminer l'équation d'état pour un explosif exige beaucoup d'expériences qui sont coûteuses. Kury et al. [Kury et al., 1965] ont développé une méthode connue sous le nom de l'essai du cylindre. Ils ont rempli un cylindre en cuivre d'explosif, ils l'ont détoné à une extrémité, et ils ont mesuré l'expansion du mur de cuivre. Les expansions résultantes du cylindre peuvent être utilisées pour ajuster numériquement les paramètres de l'équation d'état des explosifs (*cf. section 2.4*).

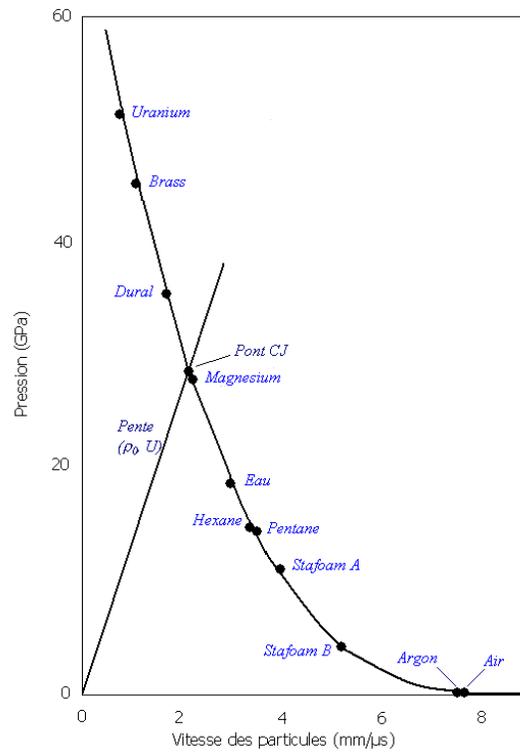


Figure 2.6 : Courbe de la pression et de la vitesse des particules pour un explosif « Composition B » [Davis, 1981]

Dans le paragraphe suivant, les conditions de saut de Rankine-Hugoniot qui permettent de définir l'état de part et d'autre du choc, seront développées.

2.3 Relations de saut de Rankine-Hugoniot

Par définition, une onde de choc est une surface de discontinuité à travers laquelle les variables caractérisant l'état fluide subissent une discontinuité,

ou un saut. Aucune description du matériau ne peut être complète sans spécifier les conditions physiques de saut qui relient les propriétés des matériaux d'un côté du choc à celles de l'autre côté. En général, ces états de saut désignés sous le nom de conditions de Rankine-Hugoniot lient les variables de part et d'autre du choc. Les relations de Rankine-Hugoniot expriment la conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie à travers une discontinuité des variables. Etant donné l'état d'un côté de la discontinuité, résoudre les relations de Rankine-Hugoniot revient à déterminer l'état de l'autre côté de la discontinuité, et la célérité de la discontinuité. La forme générale des relations peut être dérivée en considérant une loi simple de la conservation scalaire, où ϕ est la variable, F est le flux de ϕ , et x une dimension simple de l'espace [Benson, 1991]. A travers la face du choc :

$$\phi_{,t} + F(\phi)_{,x} = 0 \quad (2.8)$$

L'intégrale de l'équation (2.8) dans un domaine B dans le plan $x-t$ est nulle. En utilisant le théorème de Green, on obtient l'intégrale sur la frontière b du domaine B :

$$\oint_b (\phi dx - F(\phi) dt) = 0 \quad (2.9)$$

En divisant B en deux parties, B_1 et B_2 , par une ligne s qui représente la discontinuité (cf. *figure 2.7*), les bords correspondants sont l'union de b_1 avec s et b_2 avec s . Le chemin d'intégration est dans le sens contraire des aiguilles d'une montre. Pour éviter la confusion, s a pour indice 1 ou 2 pour indiquer la direction dans laquelle il est parcouru.

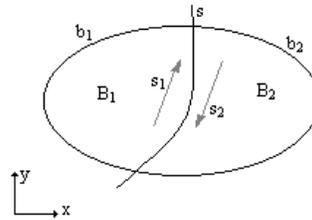


Figure 2.7 : Conditions de saut

$$\begin{aligned}
 \int_B &= \int_{b_1} + \int_{b_2} = 0 \\
 &= \int_{B_1} + \int_{B_2} = \int_{b_1} + \int_{s_1} + \int_{b_2} + \int_{s_2} \\
 &= (\int_{b_1} + \int_{b_2}) + (\int_{s_1} + \int_{s_2}) \\
 &= \int_{s_1} (\phi dx - F(\phi) dt) + \int_{s_2} (\phi dx - F(\phi) dt)
 \end{aligned} \tag{2.10}$$

L'équation (2.10) peut être simplifiée en ajoutant à ϕ et F des indices qui montrent le numéro de la partie sur laquelle ils sont évalués, et en tenant compte des différences de signe à travers s . On obtient :

$$\oint_s [\phi_2 - \phi_1] - [F_2 - F_1] dt = 0 \tag{2.11}$$

Les termes entre les crochets correspondent aux sauts à travers le choc, et ils sont généralement présentés par $[\phi]$ et $[F]$. Soit S la pente dx/dt de la courbe s à un point donné. L'interprétation physique de S est la vitesse de la discontinuité à travers le matériau. La condition de saut peut être écrite comme suit :

$$S[\phi] = [F] \tag{2.12}$$

Pour appliquer l'équation (2.12), les équations de conservation doivent être écrites dans une forme de conservation Eulérienne puisque les intégrales ont été faites dans un domaine espace-temps fixe [Benson, 1991]. La densité, la vitesse, la pression, et l'énergie totale par unité de volume sont respectivement ρ , u , P et ξ .

$$\begin{aligned}\rho_{,t} + \rho u_{,x} &= 0 \\ \rho u_{,t} + (\rho u^2 + P)_{,x} &= 0 \\ \xi_{,t} + (\xi u + Pu)_{,x} &= 0\end{aligned}\tag{2.13}$$

La substitution des équations (2.13) dans l'équation (2.12) donne les conditions de saut.

$$\begin{aligned}S[\rho] &= [\rho u] \\ S[\rho u] &= [\rho u^2 + P] \\ S[\xi] &= [\xi u + Pu]\end{aligned}\tag{2.14}$$

La solution exacte de l'équation d'état d'un gaz idéal (équation (2.15)) pour le saut de pression à travers un choc, a été déterminée par Hugoniot en 1889, et est donnée par l'équation (2.16). La vitesse du son dans le gaz idéal est a , et elle est égale à $\sqrt{\gamma(\gamma-1)e}$ où e est l'énergie interne par unité de masse [Benson, 1991].

$$P = (\gamma - 1)\rho e\tag{2.15}$$

$$P_2 - P_1 = \frac{\gamma+1}{4}\rho_1(\Delta u)^2 + \rho_1|\Delta u|\sqrt{\left(\frac{\gamma+1}{4}\right)^2(\Delta u)^2 + a_1^2}\tag{2.16}$$

La solution exacte, pour un fluide élastique linéaire (équation (2.17)) est donnée par l'équation (2.18), le module de compressibilité est K , la densité initiale est ρ_0 et la vitesse du son est $\sqrt{K/\rho}$ [Benson, 1991].

$$P = K \left(\frac{\rho}{\rho_0} - 1 \right) \quad (2.17)$$

$$P_2 - P_1 = \frac{1}{2} \rho_1 (\Delta u)^2 + \rho_1 \Delta u \sqrt{\left(\frac{\Delta u}{2} \right)^2 + a_1^2} \quad (2.18)$$

Pour la modélisation des détonations, il faut utiliser l'équation d'état des explosifs qui permet de lier la pression à la vitesse des particules des produits de gaz pendant l'expansion. L'équation la plus utilisée pour les explosifs est l'équation Jones-Wilkins-Lee (JWL) développée dans le paragraphe suivant.

2.4 Equation d'état Jones-Wilkins-Lee (JWL)

La modélisation d'un explosif exige la densité, l'énergie, la vitesse de détonation, la pression Chapman-Jouguet, et une équation d'état définie par des données expérimentales. L'état des produits de la détonation est décrit par différents types d'équations d'état (EOS), comme Becker-Kistiakowsky-Wilson (BKW), Kihara-Hikita-Tanaka (KHT), Lennard-Jones-Devonshire (LJD), et Jones-Wilkins-Lee (JWL). Quand les équations d'état BKW et KHT sont introduites dans des calculs d'ondes de choc, elles exigent un temps de calcul très long. L'équation d'état JWL, apparue vers 1965, est largement utilisée en raison de sa simplicité dans les calculs hydrodynamiques. Elle contient des paramètres, décrivant le rapport entre le volume, l'énergie et la pression des produits de détonation. L'équation d'état JWL peut être définie par sa forme isentropique suivante (forme adiabatique de la pression) [Lee et al., 1968] :

$$P_s = Ae^{-R_1V} + Be^{-R_2V} + CV^{-(\omega+1)} \quad (2.19)$$

où p est la pression, l'indice s désigne la référence à la compression ou à l'expansion isentropique, A , B , et C sont des coefficients linéaires, R_1 , R_2 , et ω sont des coefficients non linéaires, V est le volume relatif, et E est l'énergie de détonation par unité de volume. Le premier terme de l'équation d'état JWL, $A \exp(-R_1V)$ domine en premier après la détonation ($V < 1$) (cf. *figure 2.8*). Ce terme est un terme de haute pression. Le second terme est le plus grand terme pour $1 < V < 2$. Le dernier terme est appelé : terme de basse pression. C'est ce terme qui domine quand le volume relatif est suffisamment important, ainsi les termes exponentiels disparaissent.

En utilisant l'identité thermodynamique suivante, où E ($E = \rho_0 e$) est l'énergie interne par unité de volume, et e est l'énergie interne par unité de masse :

$$\left(\frac{\partial E}{\partial V} \right)_s = -p \quad (2.20)$$

l'énergie isentropique peut être trouvée :

$$E_s = \frac{A}{R_1} \exp(-R_1V) + \frac{B}{R_2} \exp(-R_2V) + \frac{C}{\omega} V^{-\omega} \quad (2.21)$$

Une équation d'état est donc créée en développant l'identité thermodynamique

$$\left(\frac{\partial E}{\partial p} \right)_v = \frac{V}{\omega} \quad (2.22)$$

où ω est le paramètre de Gruneisen.

$$p = p_s(V) + \frac{\omega}{V} [E - E_s(V)] \quad (2.23)$$

En substituant [2.19] et [2.21] dans [2.23], la forme recherchée $p(E,V)$ est obtenue. C'est l'équation d'état JWL :

$$P = A \left[1 - \frac{\omega}{R_1 V} \right] e^{-R_1 V} + B \left[1 - \frac{\omega}{R_2 V} \right] e^{-R_2 V} + \frac{\omega E}{V} \quad (2.24)$$

A, B, R_1 , R_2 et ω sont des constantes déterminées expérimentalement. Ces paramètres sont donnés par Dobratz [1981] pour une variété de matériaux explosifs. D'une manière générale, les équations d'état pour les explosifs détonants exigent un calibrage pour déterminer les valeurs des paramètres de ces matériaux. Ce calibrage est réalisé par des données expérimentales. L'expérience la plus utilisée pour calibrer ces équations d'état est l'essai du cylindre.

Kury et ses collaborateurs [Kury et al, 1965] ont décrit comment les paramètres dans leur équation isentropique [2.19] ont été déterminés à partir des essais du cylindre décrivant le comportement d'expansion p-V à des grandes expansions ($V \cong 1.5$ à 7). Le concept de cette expérience est simple. Il s'agit d'un cylindre de l'explosif détonant enfermé dans un tube en métal, et détoné à son extrémité (cf. figure 2.9). L'expansion du cylindre est observée en utilisant une caméra à balayage de fente. La configuration la plus utilisée pour les essais de cylindre est : une longueur de 300mm d'explosif, avec un diamètre de 25.4mm, enfermé dans un tube de cuivre de 2.6mm d'épaisseur.

C peut être définie en fonction des autres constantes comme suit :

$$C = V_{c_j}^{\omega+1} [p_{c_j} - A e^{-R_1 V_{c_j}} - B e^{-R_2 V_{c_j}}] \quad (2.25)$$

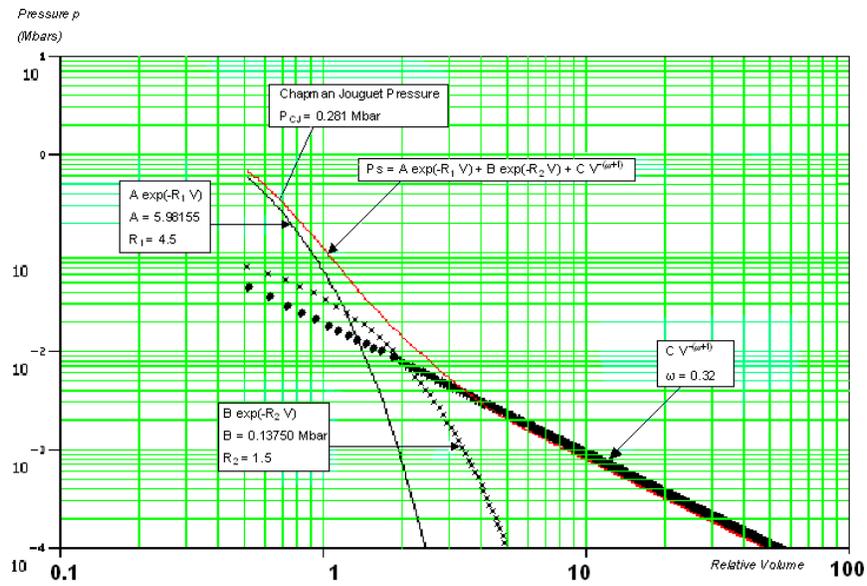


Figure 2.8 : Forme adiabatique de l'équation d'état JWL de l'explosif C-4

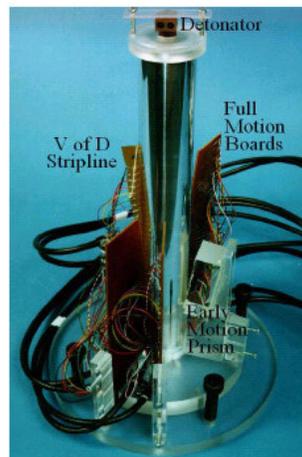


Figure 2.9 : Essai typique du cylindre [Merchant et al., 2002]

Dans une détonation CJ, la tangente de l'expansion isentrope (p_{cj}, V_{cj}) passe par l'état initial $p_0=0, V_0=1$ de l'explosif non détoné. La pente de la ligne de Rayleigh est liée à la vitesse de détonation par l'intermédiaire des lois de la conservation de la masse et de la quantité de mouvement. Cela donne l'équation :

$$\frac{0 - p_{cj}}{1 - V_{cj}} = -\rho_0 D^2 = \left. \frac{dp_s}{dV} \right|_{cj} \quad (2.26)$$

En différentiant l'équation [2.19], en substituant l'équation [2.25] dans l'équation [2.26], et en réarrangeant les termes, on obtient la valeur de B :

$$B = \frac{\rho_0 V_{cj} D^2 - (\omega + 1) p_{cj} - A (R_1 V_{cj} - \omega - 1) e^{-R_1 V_{cj}}}{(R_2 V_{cj} - \omega - 1) e^{-R_2 V_{cj}}} \quad (2.27)$$

La substitution des équations [2.25] et [2.27] dans l'équation [2.19] et le réarrangement des termes donne l'expression :

$$p_s = p_{cj} \left(\frac{V_{cj}}{V} \right)^{\omega+1} + A \left(e^{-R_1 V} - e^{-R_2 V_{cj}} \left(\frac{V_{cj}}{V} \right)^{\omega+1} \right) + \frac{\rho_0 V_{cj} D^2 - (\omega + 1) p_{cj} - A (R_1 V_{cj} - \omega - 1) e^{-R_1 V_{cj}}}{(R_2 V_{cj} - \omega - 1)} \left(\frac{e^{-R_2 V} \left(\frac{V_{cj}}{V} \right)^{\omega+1}}{e^{-R_2 V_{cj}} \left(\frac{V_{cj}}{V} \right)^{\omega+1}} \right) \quad (2.28)$$

En utilisant des données du comportement p-V par un code d'équilibre thermodynamique, cela peut donner les quatre paramètres A, R1, R2 et ω . Les équations [2.27] et [2.25] donnent respectivement les valeurs de B et C.

2.5 Aperçu sur les hydrocodes

Afin de réaliser une simulation numérique des phénomènes transitoires rapides, les codes de propagation d'ondes (ou les hydrocodes) ont été développés depuis les années 50 afin d'étudier la propagation d'ondes de choc dû à l'impact, la pénétration, ou la détonation dans les fluides et les solides. Ils sont des outils numériques de la mécanique des milieux continus qui permettent la simulation de la réponse des matériaux solides et fluides sous fortes conditions dynamiques. Le premier hydrocode (HEMP) a été développé par Wilkins [Wilkins, 1964]. Dans ce genre de codes basés sur une discrétisation dans l'espace et le temps, les équations de la conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie sont résolues. On utilise aussi une équation d'état (EOS) donnant la relation entre la pression, la densité et l'énergie interne. Le développement des capacités des hydrocodes a été initialement mené par des exigences militaires liées aux explosifs et à l'impact à haute vitesse. Cependant, ces outils ont été récemment appliqués dans divers domaines tels que l'analyse des détonations, le crash d'automobile [Du Bois, 1990], [Frank and Gruber, 1991], [Belytschko et al., 1993], [Logan et al., 1993], le déploiement des airbags [Choi, 1994], la sécurité des automobiles et des trains [Du Bois, 1990], et l'impact d'oiseaux sur des carlingues d'avions [Du Bois, 1990], [Luttwak et al., 1992]. Plusieurs méthodes sont en général utilisées : Lagrangiennes, Eulériennes, Arbitraires Lagrange-Euler (ALE) et Couplage Euler-Lagrange (CEL).

2.5.1 Hydrocodes Lagrangiens

Les mailles numériques d'un modèle Lagrangien suivent les mouvements du matériau. Puisque la masse dans chaque élément reste fixe, aucun flux de masse ne doit être calculé, ainsi le calcul est relativement direct et rapide. Les prédécesseurs des hydrocodes Lagrangiens modernes sont HEMP [Wilkins, 1964], TOODY [Swegle, 1978], 2DL [Johnson et al., 1981] et HONDO [Key, 1974]. EPIC [Johnson et al., 1994], diverses versions de DYNA [Hallquist, 1988, 1991], [Whirley and Hallquist, 1991], PRONTO

[Taylor and Flanagan, 1987, 1989], [Attaway, 1990], [Bergmann, 1991], etc. sont les hydrocodes Lagrangiens les plus importants. Des hydrocodes Lagrangiens ont été couplés avec des hydrocodes Eulériens afin que des problèmes d'interaction fluide-structure à grandes déformations puissent être traités. La méthode Lagrangienne peut également être considérée comme une variante de la méthode Arbitraire Lagrange-Euler (ALE).

2.5.2 Hydrocodes Eulériens

En modélisant des problèmes à grandes déformations dans un maillage fixe, les codes Eulériens évitent le problème de distorsion des mailles lié aux méthodes Lagrangiennes. Dans les hydrocodes Eulériens, pour chaque pas de temps, la solution se compose d'une phase Lagrangienne, suivie d'une phase d'advection, qui remplace les mailles déformées à leurs états initiaux. Les éléments contenant deux matériaux ou plus sont fréquents dans les calculs Eulériens, c'est la raison pour laquelle les coûts CPU de ces codes sont importants. Les hydrocodes Eulériens les plus importants sont CTH [McGlaun, 1990, 1991], [Silling, 1992, 1994], [Kerley, 1991, 1992], [Taylor, 1992, 1995, 1996], [Crawford, 1995], [Farnsworth, 1995], MESA [Holian et al., 1989], [Mandell et al., 1989], etc. La méthode Eulérienne peut être également considérée comme une variante de la méthode Arbitraire Lagrange-Euler (ALE).

2.5.3 Hydrocodes Arbitraires Lagrange-Euler (ALE)

Les hydrocodes ALE partagent certains aspects avec les hydrocodes Lagrangiens et Eulériens. Le mouvement Lagrangien est calculé à chaque pas de temps, suivi d'une phase d'advection. La description spatiale des mailles n'est limitée ni aux mouvements des matériaux (Lagrangien) ni aux mailles fixes dans l'espace (Eulérien). Les mouvements des mailles ALE sont basés principalement sur des algorithmes qui conservent l'uniformité du maillage. VEC/DYNA3D [Hallquist and Stillman, 1991], LS-DYNA (LSTC [Hallquist, 1997]), et AUTODYN-3D (Century Dynamics [1989])

donnent la possibilité d'utiliser ALE (chaque maille ne peut contenir qu'un seul matériau). Parmi les hydrocodes ALE multi-matériaux, on peut citer CALE [Tipton, 1992], CAVEAT [Addessio et al., 1992], ALE3D [Anderson et al., 1993], [Neely et al., 1995], ALEGRA (initialement appelé RHALE) (Peery et al. [1993]), MSC/DYTRAN [Keene and Prior, 1991]) et LS-DYNA (LSTC [Hallquist, 1997]).

2.5.4 Hydrocodes de couplage Euler-Lagrange (CEL)

Le rôle de l'application du couplage Euler-Lagrange est de discrétiser les solides dans des mailles Lagrangiennes, et les fluides dans des mailles Eulériennes. Les régions Eulériennes et Lagrangiennes agissent les unes sur les autres, permettant le couplage du fluide et de la structure. Un code CEL comporte trois modules : Eulérien, Lagrangien et couplage. Le premier code de couplage Euler-Lagrange est CEL [Noh, 1964]. MSC/DYTRAN ([Pohl et al., 1984], [Keene and Prior, 1991]), MSC/PISCES [Hancock, 1985], [Groenenboom, 1991]), HULL [Matuska and Osborne, 1986], DYSMAS/ELC (AUTODYN-2D (Century Dynamics [1989])) et le couplage de CTH avec EPIC [Yarrington, 1994], Yarrington and Prentice [1995]) sont les premiers hydrocodes CEL utilisés. Les possibilités de modéliser l'interaction entre les explosions sous-marines et les structures navales ont été démontrées avec la méthode CEL en utilisant DYSMAS/ELC ([Pfrang et al., 1988], [Schittke et al., 1989], [Andelfinger, 1994], [McKeown et al., 1994]) et MSC/DYTRAN ([Lenselink and DeVries, 1994], [Chisum and Shin, 1995]), etc.

L'une des caractéristiques de la propagation d'ondes de forte amplitude est la présence d'ondes de choc, qui se définissent comme une discontinuité sur la vitesse, la température, etc. Les équations partielles régissant le mouvement exigent des conditions aux limites reliant les quantités (densité, pression, etc.) des deux côtés de chaque surface de choc. Les conditions aux limites nécessaires sont fournies par les équations de Rankine-Hugoniot présentées dans la section (2.3). Cependant, leur application est compliquée parce que le mouvement des surfaces de choc

est lié aux éléments du maillage, et le déplacement de cette frontière n'est pas connu à l'avance, mais il est régi par des équations et des conditions aux limites non linéaires. Par conséquent, le traitement des chocs exige des calculs longs, voire des erreurs à chaque pas de temps de calcul. En plus, de grandes oscillations se produisent derrière le front de choc à cause de l'incapacité des méthodes numériques de base de traiter les discontinuités associées aux ondes de choc. Des méthodes spéciales de calculs sont nécessaires pour déterminer les chocs qui se manifestent mathématiquement comme des surfaces sur lesquelles la densité, la vitesse du fluide, la température, etc. ont des discontinuités. Des méthodes numériques ont été développées pour mieux calculer les ondes de choc. L'approche largement utilisée dans les calculs hydrodynamiques est l'addition d'une viscosité artificielle de choc qui étale l'onde de choc sur plusieurs mailles, et régularise ainsi la discontinuité. La méthode la plus utilisée est la méthode de la viscosité de choc qui sera développée dans la section suivante.

2.6 Méthode de la viscosité de choc

La viscosité artificielle n'est pas une viscosité réelle. C'est un terme utilisé pour des raisons purement numériques. Depuis l'introduction du concept de la viscosité artificielle par Von Neumann et Richtmyer [Von Neumann and Richtmyer, 1950], différentes formes de viscosités ont été développées. Un terme de viscosité q est ajouté à la pression pour amortir les oscillations. Dans une dimension, la valeur de la viscosité peut être définie clairement, mais l'extension aux multiples dimensions est considérablement plus difficile à présenter [Benson, 1992].

D'autre part, bien que l'addition d'une viscosité de choc est une approche simple et robuste pour répondre aux problèmes de choc, elle a quelques inconvénients. Les chocs sont étalés sur quatre à six éléments, par conséquent, les tailles des mailles doivent être assez fines de sorte que la largeur de choc de six éléments soit petite par rapport aux dimensions du problème. Des méthodes adaptatives ont été développées de sorte que des

mailles fines soient utilisées seulement dans le choc (*cf. Chapitre 4*). Dans les calculs explicites, la taille du pas de temps est limitée à la taille de l'élément le plus petit. Par conséquent, les éléments dans le choc contrôlent le pas de temps dans les méthodes adaptatives. Une approche entièrement différente a été prise par Godunov [Godunov, 1959]. Sa méthode, qui est basée sur la résolution du problème de Riemann à chaque nœud, élimine aussi les oscillations derrière le front de choc.

Même si les autres méthodes comme les méthodes de Glimm [Glimm, 1965] ont été développées pour résoudre les problèmes impliquant les chocs, les méthodes de la viscosité de choc et de Godunov sont les plus utilisées dans les hydrocodes. Actuellement, la plupart des hydrocodes utilisent la méthode de viscosité, on peut citer : CSQ [Thompson, 1975], CTH [McGlaun et al., 1990], DYNA2D [Hallquist, 1984], DYNA3D [Hallquist and Benson, 1987], MESA [Holian et al., 1989]. Les raisons de la popularité de cette méthode sont sa simplicité et son exactitude pour la plupart des problèmes.

2.6.1 Viscosité de choc dans une dimension

2.6.1.1 Viscosité artificielle de Von Neumann et Richtmyer

Von Neumann et Richtmyer [Von Neumann and Richtmyer, 1950] ont décrit une méthode de traitement automatique des chocs. Leur concept était d'ajouter une viscosité artificielle de choc, q , dans les équations afin de donner aux chocs une épaisseur équivalente à l'espacement des nœuds. Quand la viscosité est prise en considération, les chocs sont étalés de sorte que les surfaces mathématiques de la discontinuité soient remplacées par des couches minces dans lesquelles la pression, la densité, la température, etc. changent rapidement et sans interruption. Le paramètre de la viscosité est donc choisi de façon à ne pas perturber les longueurs caractéristiques du problème modélisé. Ainsi, les équations différentielles sont résolues dans tout le domaine de calcul, même sur la surface du choc. Le terme de la viscosité élimine la plupart des oscillations derrière le choc.

Von Neumann et Richtmyer ont démontré que les relations de Rankine-Hugoniot sont satisfaites à travers le choc. Le terme q est ajouté à la pression P dans les équations de la quantité de mouvement et de l'énergie. Sa forme choisie est quadratique et il est fonction du taux de déformation [Benson, 1992] :

$$q = -\rho (c \Delta x)^2 \frac{\partial u}{\partial x} \left| \frac{\partial u}{\partial x} \right| \quad (2.29)$$

où c est une constante sans dimension proche de l'unité, et Δx est le pas du maillage. Les travaux de Kuropatenko [Kuropatenko, 1967] et Wilkins [Wilkins, 1980] ont utilisé l'approximation standard dans un élément de deux nœuds donnée par l'équation (2.30a). La viscosité peut alors être écrite en fonction du saut de vitesse à travers l'élément (équation 2.30b).

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\Delta u}{\Delta x} \quad (2.30a)$$

$$q = -\rho c^2 \Delta u |\Delta u| \quad (2.30b)$$

Ils ont prouvé que lorsque q est utilisé pour traiter les chocs, les équations hydrodynamiques ont des solutions sans discontinuités. Le terme q n'a pas d'incidence sur la solution extérieure au choc :

$$\begin{aligned} q &= c_0 \rho (\Delta x)^2 \left(\frac{\partial \dot{x}}{\partial x} \right)^2 & \text{si } \frac{\partial \dot{x}}{\partial x} < 0 \\ q &= 0 & \text{si } \frac{\partial \dot{x}}{\partial x} \geq 0 \end{aligned} \quad (2.31)$$

2.6.1.2 Viscosité artificielle de HEMP

Landshoff [Landshoff, 1955] avait noté que la viscosité quadratique marche raisonnablement bien, mais des petites oscillations se produisent après le choc. Il avait utilisé une combinaison linéaire de deux viscosités qui donne des résultats meilleurs que ceux obtenus en utilisant chacune des viscosités séparément. Kuropatenko [Kuropatenko, 1967] avait noté la similitude entre les équations de saut de la pression à travers un gaz idéal et un fluide élastique, équations (2.16) et (2.18). Pour les chocs où le saut de vitesse est plus grand que la vitesse du son, le saut de pression est quadratique [Benson, 1992]. Ainsi, pour un gaz idéal :

$$P_2 - P_1 = \frac{1}{2} (\gamma + 1) \rho_1 (\Delta u)^2 \quad (2.32)$$

Pour un fluide élastique :

$$P_2 - P_1 = \rho_1 (\Delta u)^2 \quad (2.33)$$

En comparant les solutions analytiques aux équations (2.32) et (2.33), les valeurs théoriques pour c_0 sont $(\gamma + 1)/2$ pour un gaz idéal, et 1 pour un fluide élastique. La viscosité, q , est définie comme étant le saut de la pression à travers le choc, $P_2 - P_1$. La viscosité linéaire est obtenue en considérant les termes des solutions analytiques quand le saut de vitesse est beaucoup plus petit que la vitesse du son [Benson, 1991]. Pour les deux matériaux :

$$q = P_2 - P_1 = \rho_1 a_1 |\Delta u| \quad (2.34)$$

En combinant les équations (2.32) et (2.33) et l'équation (2.34) dans une seule expression, on obtient la forme quadratique et linéaire, qui est généralement utilisée aujourd'hui [Benson, 1991].

$$q = c_0 \rho (\Delta u)^2 + c_L a \rho |\Delta u| \quad (2.35)$$

où q est la viscosité de choc, c_0 est le coefficient quadratique de la viscosité, c_L est le coefficient linéaire de la viscosité, ρ est la densité, a est la vitesse du son, et Δu est le saut de vitesse à travers un choc, qui est la différence entre les vitesses nodales.

$$\Delta u = u_{i+1}^{n-1/2} - u_i^{n-1/2} \quad (2.36)$$

Les coefficients c_0 et c_L sont choisis en pratique de sorte que de fausses oscillations n'aient pas d'effets indésirables sur la solution. Pour plusieurs matériaux, les valeurs de 1.5 pour c_0 et 0.06 pour c_L donnent de bons résultats.

2.6.2 Viscosité de choc dans deux dimensions

Plusieurs questions se posent lors de l'extension de la viscosité à 2 ou 3 dimensions : La viscosité est-elle traitée comme un terme scalaire de pression ou comme un tenseur ? Comment le saut de la vitesse à travers le choc est-il calculé ? Comment déterminer exactement la direction du choc ? Plusieurs méthodes, qui changent selon le coût, l'exactitude et la stabilité, ont répondu à ces questions.

2.6.2.1 Extension standard

L'extension standard est la méthode la plus efficace et la plus stable pour la plupart des problèmes des chocs. Cette approche ajoute aussi une viscosité à la pression, et elle suit d'une façon très proche le développement initial de la méthode de la viscosité de Von Neumann et Richtmyer. Pour implémenter la viscosité dans deux dimensions, il est nécessaire de calculer le saut de vitesse à travers le choc dans l'élément. Cette tâche est simplifiée par le calcul du saut comme le produit de la longueur caractéristique d'un élément et le taux de déformation normal au front de choc [Benson, 1992], où la direction normale est x_s . Par exemple, pour la viscosité de choc dans DYNA2D, la longueur caractéristique de l'élément est par défaut \sqrt{A} , où A est l'aire d'un élément, et le taux de déformation caractéristique est la trace du tenseur de taux de déformation.

$$\Delta u = \Delta X \frac{\partial u}{\partial x_s} \quad (2.37)$$

avec

$$\Delta X = \sqrt{A}$$

$$\frac{\partial u}{\partial x_s} = tr(\dot{\epsilon}) \quad (2.38)$$

Même si cette formulation est simple et puissante, il y a un nombre d'inconvénients.

Par exemple, un problème apparaît quand les éléments ont un grand allongement, R . Supposons un choc se propageant dans la direction courte de l'élément dans un problème plan [Benson, 1991]. Le saut de vitesse calculé serait un facteur de \sqrt{R} plus grand que le saut actuel. Si le pas de temps n'est pas calculé soigneusement, le calcul pourrait devenir instable. Supposons que le calcul reste stable, la viscosité aura des coefficients quadratiques et linéaires qui ont respectivement des facteurs R et \sqrt{R} plus grands en comparaison avec la viscosité calculée avec le saut

correct. Par conséquent, le choc sera étalé sur plus d'éléments que nécessaire. Réciproquement, si le choc se propage dans la direction longue, le saut sera un facteur de \sqrt{R} plus faible, la viscosité sera aussi faible, et les oscillations apparaîtront après le choc, ou le calcul peut devenir instable.

2.6.2.2 Viscosité de HEMP

Wilkins a introduit une formulation de viscosité en prenant en compte la direction du choc [Wilkins, 1980]. Celle ci est prise en parallèle à l'accélération du centre de l'élément. Les longueurs caractéristiques et les taux de déformations basés sur cette direction sont calculés. Comme dans la formulation précédente, la viscosité est traitée comme un terme de pression. Quand la viscosité de Wilkins a été utilisée dans DYNA2D pour résoudre un certain nombre d'applications, les résultats étaient meilleurs. La direction du choc, \vec{n} , est calculée en utilisant les accélérations nodales du pas de temps précédent [Benson, 1992].

$$\begin{aligned} \ddot{x} &= \ddot{x}_1 + \ddot{x}_2 + \ddot{x}_3 + \ddot{x}_4 & \ddot{y} &= \ddot{y}_1 + \ddot{y}_2 + \ddot{y}_3 + \ddot{y}_4 \\ n_1 = \cos \alpha &= \frac{\ddot{x}}{\sqrt{\ddot{x}^2 + \ddot{y}^2}} & n_2 = \sin \alpha &= \frac{\ddot{y}}{\sqrt{\ddot{x}^2 + \ddot{y}^2}} \end{aligned} \quad (2.39)$$

Le taux de déformation dans la direction du choc est $\vec{n}^t [\dot{\epsilon}] \vec{n}$

$$\frac{\partial u}{\partial x_s} = \dot{\epsilon}_{xx} \cos^2 \alpha + \dot{\epsilon}_{yy} \sin^2 \alpha + 2\dot{\epsilon}_{xy} \cos \alpha \sin \alpha \quad (2.40)$$

La longueur caractéristique ΔX est calculée en divisant l'aire de l'élément par la largeur moyenne de l'élément dans la direction normale à la direction du choc (cf. figure 2.10).

$$\Delta X = \frac{2A}{d_1 + d_2 + d_3 + d_4} \quad (2.41)$$

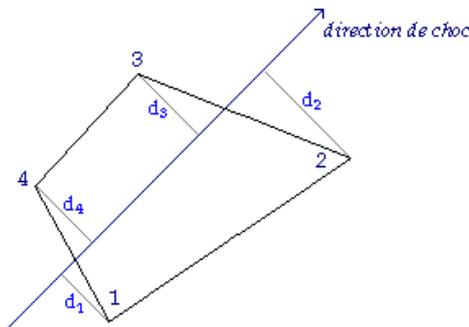


Figure 2.10 : Calcul de la longueur caractéristique de l'élément selon Wilkins

Cette formulation est très avantageuse en termes d'exactitude. La plupart de ses limitations proviennent de la façon avec laquelle elle calcule la direction du choc. L'accélération moyenne n'est pas toujours un indicateur fiable de la direction du choc, et elle peut mener à des résultats incorrects quand les chocs s'interceptent. Le cas le plus simple à considérer est un tube à choc avec des ondes se propageant des extrémités vers le centre. L'élément central sera choqué, mais il ne sera pas accéléré.

2.7 Conclusion

La modélisation des phénomènes de détonation demande la connaissance de plusieurs caractéristiques de l'explosif tels que la pression de Chapman-Jouguet, la vitesse de détonation, etc. Nous avons aussi présenté dans ce chapitre l'équation d'état Jones-Wilkins-Lee largement utilisée dans ce domaine, et la méthode de viscosité de choc, nécessaire pour une bonne

résolution des phénomènes de détonation. Le choix de la méthode utilisée est très essentiel pour chaque cas à modéliser. Plusieurs méthodes existent, et chacune de ces méthodes présente des avantages et des inconvénients. Le chapitre suivant sera consacré à la modélisation de différentes applications en utilisant la méthode Eulérienne multi-matériaux afin de pouvoir montrer sa capacité à modéliser des problèmes de détonation.

Chapitre 3

Modélisation des détonations en utilisant la méthode Eulérienne Multi-Matériaux

3.1 Introduction

Un grand nombre d'algorithmes et de méthodes existe pour la solution numérique d'écoulements de fluides décrits par les équations Navier-Stokes. Ces algorithmes peuvent être classés comme des algorithmes Eulériens, Lagrangiens et mixtes. Chacun de ces algorithmes a ses propres avantages et inconvénients. Dans une description Lagrangienne, chaque maille contient toujours le même élément fluide, i.e. le domaine de calcul suit la dynamique des particules fluides, ce qui simplifie beaucoup les équations régissant. Quand les déformations des mailles ne sont pas très grandes comme dans le cas de plusieurs problèmes de la mécanique des solides, on peut utiliser cette approche qui a été prouvée très précise aussi longtemps que le maillage reste régulier. Son intérêt provient de sa capacité à suivre les points matériels et sa simplicité dans l'application des conditions aux limites. Cependant, elle est limitée par les distorsions des mailles, et il n'est pas souhaitable de l'utiliser pour des problèmes de grandes déformations tels que l'impact à haute vitesse et les détonations. Différentes formulations ont été développées pour résoudre les problèmes de grandes déformations. On peut citer :

- la formulation Eulérienne qui modélise la dynamique d'un unique matériau sur un maillage fixe.
- la formulation Eulérienne multi-matériaux pour laquelle plusieurs matériaux différents peuvent être modélisés par un maillage fixe.

- la formulation ALE, qui est une méthode où le maillage peut se déplacer indépendamment du mouvement d'un matériau unique (les frontières du maillage restent Lagrangiennes).
 - et la formulation ALE multi-matériaux, qui permet au maillage de se déplacer indépendamment de la dynamique des matériaux modélisés.
- Cette dernière méthode sera développée dans le chapitre 4.

Dans ce chapitre, l'outil numérique utilisé pour la modélisation de différents problèmes de détonation est la formulation Eulérienne multi-matériaux. Le concept multi-matériaux est utilisé dans plusieurs hydrocodes, mais son implémentation est plus complexe qu'une formulation simple-matériau, et il exige une mémoire plus grande. Des données additionnelles sont nécessaires pour décrire les contenus courants de chaque élément, et des calculs additionnels doivent être développés pour la mise à jour des données. Les codes Eulériens doivent calculer le transport des matériaux à travers les mailles. Il y a deux différentes structures des codes Eulériens : une approche met à jour les variables de la solution dans un seul pas, autrement dit, elle consiste à résoudre la totalité du système d'équations. Parmi les codes qui utilisent cette approche, on peut citer le code HEMP [Hageman et al., 1975]. Des recherches plus récentes sur la résolution des équations Eulériennes ont utilisé cette approche, par exemple ([Roache, 1976], [Sod, 1978], [Hughes and Tezduyar, 1984]). L'autre approche sépare les termes Lagrangiens et Eulériens dans deux pas. Premièrement, un pas Lagrangien est effectué. Il permet aux mailles de suivre le matériau. La solution sur le maillage distordu est restructurée au maillage Eulérien initial dans un pas séparé, appelé : advection. Cette méthode est appelée méthode split.

Au début, Les méthodes Eulériennes avaient été utilisées comme un dernier recours pour résoudre quelques problèmes à cause de leur pauvre résolution d'interfaces des matériaux. Cependant, cela a changé avec l'introduction des algorithmes de haute résolution de suivi d'interface. Un exemple de la précision des méthodes de suivi d'interface, concernant l'expansion du gaz issu de l'explosion du C-4 dans l'air en utilisant LS-DYNA, est montré sur la figure (3.1), où le matériau en rouge présente le gaz produit par la détonation, et le matériau en bleu présente l'air.

L'objectif de ce chapitre est de montrer que cette méthode est capable de prédire le comportement de l'onde explosive ainsi que l'historique de la pression à une distance donnée de l'explosif, en comparant les résultats numériques aux résultats expérimentaux. Les deux premières études concernent la détonation du C-4 dans l'air dans le cas sans et avec mur. Cette modélisation nécessite l'utilisation d'un huitième de sphère pour le cas sans mur, et un quart de sphère pour le cas avec mur. Une troisième étude a été réalisée, c'est le cas d'une explosion du cordeau détonnant en forme de droite, spirale, et cercle. L'objectif est de montrer si la méthode Eulérienne multi-matériaux donne de bons résultats dans le cas d'une convergence d'ondes de choc.

Avant de présenter la modélisation de ces problèmes de détonation, la méthode Lagrangienne et la méthode Eulérienne multi-matériaux sont présentées dans la section suivante.

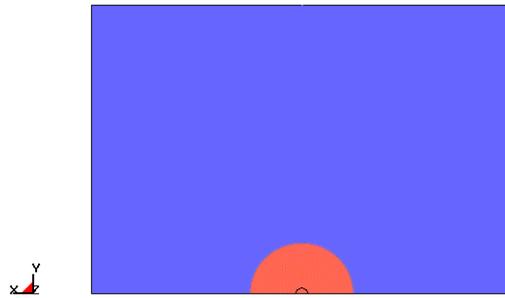


Figure 3.1 : Expansion du gaz de l'explosif C-4 dans l'air à $t=100\mu\text{s}$

3.2 Méthode Lagrangienne

Dans une formulation Lagrangienne, les nœuds et les éléments du maillage suivent les mouvements du matériau. Les conditions aux limites sont facilement imposées puisque les frontières du maillage suivent les limites du domaine physique. Au début, la forme forte des équations régissant sera présentée. Ensuite, le principe des puissances virtuelles qui permet d'écrire la forme faible sur une configuration déformée sera développé.

3.2.1 Forme forte

La conservation de masse dans une méthode Lagrangienne est donnée par l'équation (3.1a).

$$\rho J = \rho_0 \quad (3.1a)$$

où J est le jacobien de la transformation du mouvement du matériau.

$$J = \det \left(\frac{\partial x_i}{\partial X_j} \right) \quad (3.1b)$$

i et j varient de 1 au nombre de dimensions. x et X sont respectivement la coordonnée courante, et la coordonnée Eulérienne [Benson, 1992]. L'équation de la quantité de mouvement (éq. 3.2) décrit l'accélération d'un point dans un corps en fonction de chargements externes (la gravité, le gradient de champ de contrainte et la densité du matériau). L'accélération peut être intégrée dans le temps pour trouver la vitesse et le déplacement

$$\rho \dot{u}_i = \sigma_{ij,j} + \rho f_i \quad (3.2)$$

où u_i représente les composantes de la vitesse, σ est le tenseur de la contrainte de Cauchy, f_i sont les composantes de la force de volume (gravité).

L'équation de l'énergie (3.3) est utilisée pour la mise à jour de l'énergie interne pour l'équation d'état, et assurer la conservation de l'énergie dans un hydrocode.

$$\rho \dot{e}_i = \sigma_{ij} \dot{\epsilon}_{ij} + \rho f_i u_i \quad (3.3)$$

où e_i est l'énergie interne par unité de masse, $\dot{\epsilon}_{ij}$ est le taux de déformation.

3.2.2 Forme faible

La méthode des éléments finis utilise la forme faible de l'équation de la quantité de mouvement. En mécanique, la forme faible est souvent appelée : principe du travail virtuel. Une solution pour x qui satisfait l'équation (3.2) satisfait l'équation (3.4) pour tout déplacement virtuel admissible δx [Benson, 1992].

$$\int_{\Omega} (\rho \dot{u}_i - \sigma_{ij,j} - \rho f_i) \delta x_i d\Omega + \int_{\Gamma_{\tau}} (\sigma_{ij} n_j - \tau_i) \delta x_i d\Omega - \sum_{k=1}^n f_i^*(X_k, t) \delta x_i(X_k) = 0 \quad (3.4)$$

En utilisant le théorème de la divergence, les deux termes contenant la contrainte de Cauchy sont combinés.

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \sigma_{ij,j} \delta x_i d\Omega &= \int_{\Gamma} \sigma_{ij,j} n_j \delta x_i d\Omega \\ \sigma_{ij} \delta x_{i,j} &= (\sigma_{ij} \delta x_i)_{,j} - \sigma_{ij,j} \delta x_i \end{aligned} \quad (3.5)$$

La substitution de l'équation (3.5) dans (3.4) donne le travail virtuel $\delta \pi$.

$$\delta \pi = \int_{\Omega} [(\rho \dot{u}_i - \rho f_i) \delta x_i - \sigma_{ij} \delta x_{i,j}] d\Omega - \int_{\Gamma_{\tau}} \tau_i \delta x_i d\Gamma - \sum_{k=1}^n f_i^*(X_k, t) \delta x_i(X_k) = 0 \quad (3.6)$$

3.2.3 Méthode de la différence centrée

Généralement, les méthodes qui sont actuellement populaires pour résoudre les problèmes hydrodynamiques sont explicites. La solution est avancée du temps t^n au temps t^{n+1} , donnant un pas de temps $\Delta t^{n+1/2}$. La méthode de la différence centrée, utilisée dans la plupart des hydrocodes, est basée sur l'approximation de la différence centrée du second ordre, qui est dérivée d'une expansion en série de Taylor. L'exposant n indique que la fonction est évaluée à t^n .

$$f^n = f^{n+\frac{1}{2}} - \left(\frac{\Delta t^{n+\frac{1}{2}}}{2}\right) f' \left(t^{n+\frac{1}{2}}\right) + \frac{1}{2} \left(\frac{\Delta t^{n+\frac{1}{2}}}{2}\right)^2 f'' \left(t^{n+\frac{1}{2}}\right) + \dots \quad (3.7a)$$

$$f^{n+1} = f^{n+\frac{1}{2}} + \left(\frac{\Delta t^{n+\frac{1}{2}}}{2}\right) f' \left(t^{n+\frac{1}{2}}\right) + \frac{1}{2} \left(\frac{\Delta t^{n+\frac{1}{2}}}{2}\right)^2 f'' \left(t^{n+\frac{1}{2}}\right) + \dots \quad (3.7b)$$

La soustraction de l'équation (3.7b) et de l'équation (3.7a) donne la règle explicite d'intégration du second ordre :

$$f^{n+1} = f^n + f' \left(t^{n+\frac{1}{2}}\right) \left(\Delta t^{n+\frac{1}{2}}\right) + O \left(\left(\Delta t^{n+\frac{1}{2}}\right)^3 \right) \quad (3.8)$$

Soit x le déplacement x , l'équation (3.8) donne :

$$x^{n+1} = x^n + \Delta t^{n+\frac{1}{2}} u^{n+\frac{1}{2}} \quad (3.9)$$

où u est la vitesse.

L'expression (3.10) donne la vitesse à $t=n+1/2$ [Benson, 1992].

$$u^{n+\frac{1}{2}} = u^{n-\frac{1}{2}} + \Delta t^n a^n = u^{n-\frac{1}{2}} + \Delta t^n (F^n/M) \quad (3.10)$$

3.2.4 Contrôle du pas de temps

La taille du pas de temps de la méthode de la différence centrée est déterminée par des considérations de stabilité. Pour des problèmes traités par la méthode explicite, la taille du pas de temps est donnée par la condition de Courant-Friedrichs-Lewy (CFL), qui implique qu'une perturbation se déplaçant à la vitesse du son ne peut traverser, sur un pas de temps, la plus petite distance séparant deux nœuds dans un maillage. Ce nombre est une fonction de la géométrie de l'élément et de la vitesse du son dans le matériau.

$$\Delta t \leq \frac{\Delta x}{c} \quad (3.11)$$

où Δx est la longueur caractéristique de l'élément le plus petit, et c est la vitesse du son.

L'introduction de la viscosité de choc exige que la condition CFL soit modifiée [Benson, 1992].

$$\Delta t \leq \frac{\Delta x}{q + \sqrt{q^2 + c^2}} \quad (3.12a)$$

avec

$$\begin{aligned} q &= c_L c + c_0 |\Delta u| && \text{pour } \Delta u < 0 \\ q &= c_L c && \text{pour } \Delta u \geq 0 \end{aligned} \quad (3.12b)$$

où c_0 et c_L sont respectivement le coefficient quadratique et le coefficient linéaire de la viscosité de choc, q est un coefficient d'amortissement. Le pas de temps pour chaque élément est évalué suivant l'équation (3.12a), et le pas de temps stable pour le système est la valeur minimale de tous les éléments. Le pas de temps est souvent multiplié par un facteur (< 1) pour assurer la stabilité. Par exemple, ce facteur dans DYNA3D [Hallquist and Benson, 1987] est par défaut égal à 0.90 (0.67 s'il y a des matériaux explosifs), dans DYNA2D [Hallquist, 1984], 0.67, dans SHALE [Demuth et al., 1985], 0.25, dans TENSOR [Maenchen and Sack, 1964], 0.25, et dans HEMP [Wilkins, 1964], 0.333.

3.2.5 Calcul des forces aux nœuds

Les calculs des forces sont généralement déterminés à partir de la forme faible de l'équation de la quantité de mouvement. Les déplacements $x_{\alpha i}$ et les vitesses $u_{\alpha i}$ sont connus aux nœuds, où α est le numéro du nœud, et i est la direction. Il est supposé que les valeurs des déplacements, des vitesses et des accélérations peuvent être interpolées de leurs valeurs nodales à tout point [Benson, 1992], où $N_\alpha(x)$ est la fonction d'interpolation associée au nœud α .

$$\begin{aligned}x_i(x) &= N_\alpha(x) x_{\alpha i} \\u_i(x) &= N_\alpha(x) u_{\alpha i} \\ \dot{u}_i(x) &= N_\alpha(x) \dot{u}_{\alpha i}\end{aligned}\tag{3.13}$$

De la même manière, la variation de déplacement peut être interpolée.

$$\delta x_i(x) = N_\alpha(x) \delta x_{\alpha i}\tag{3.14}$$

Le gradient de la variation est évalué en différentiant les fonctions d'interpolation.

$$\frac{\partial \delta x_i}{\partial x_j} = \frac{\partial N_\alpha}{\partial x_j} \delta x_{\alpha i} \quad (3.15)$$

La substitution des équations précédentes dans la forme faible de l'équation de la quantité de mouvement (3.4) donne la forme suivante :

$$\left[\int_{\Omega} \rho N_\beta \dot{u}_{\beta i} N_\alpha d\Omega + \int_{\Omega} \sigma_{ij} \frac{\partial N_\alpha(x)}{\partial x_j} d\Omega - \int_{\Omega} \rho f_i N_\alpha d\Omega - \int_{\Gamma_\tau} \tau_i N_\alpha d\Gamma - \sum_{k=1}^n f_i^*(X_k, t) N_\alpha(X_k) \right] \delta x_{\alpha i} = 0 \quad (3.16)$$

Puisque les déplacements virtuels aux nœuds $\delta x_{\alpha i}$ sont arbitraires, le terme inclus entre les deux crochets doit être nul. Les accélérations aux nœuds sont calculées en résolvant l'ensemble des équations linéaires obtenues par un réarrangement de l'équation (3.16).

$$\left[\int_{\Omega} \rho N_\beta N_\alpha d\Omega \right] \{ \dot{u}_{\beta i} \} = \left\{ - \int_{\Omega} \sigma_{ij} \frac{\partial N_\alpha}{\partial x_j} d\Omega + \int_{\Omega} \rho f_i N_\alpha d\Omega + \int_{\Gamma_\tau} \tau_i N_\alpha d\Gamma + \sum_{k=1}^n f_i^*(X_k, t) N_\alpha(X_k) \right\} \quad (3.17)$$

Le premier terme qui est inclus entre les deux crochets est la matrice de masse consistante. Les équations sont couplées parce que la matrice de masse consistante n'est pas diagonale, et la résolution de ce système n'est pas attractive dû au coût élevé des calculs. Dans les hydrocodes, la masse est supposée concentrée aux nœuds. Cela amène à une matrice de masse diagonale, qui simplifie beaucoup la relation entre les forces et les accélérations. Cette matrice est utilisée à la place de la matrice de masse consistante. La matrice de masse consistante est désignée M_c , et la matrice de masse diagonale est désignée M . Les deux matrices ont quatre indices $\alpha i \beta j$, où αi réfère au $i^{\text{ème}}$ composante du déplacement du nœud α , et βj

réfère au $j^{\text{ème}}$ composante du déplacement du nœud β . La masse de l'élément à n nœuds est M_A .

$$M_{\alpha i \beta j}^c = \int_{\Omega} \rho N_{\beta} N_{\alpha} d\Omega \quad (3.18)$$

$$M_{\alpha i \beta j} = \delta_{\alpha \beta} \delta_{ij} \frac{1}{n \text{ nœuds}} \sum_A M_A \quad (3.19)$$

L'intégration du 2^{ème} terme de l'équation de la quantité de mouvement (3.16) est simplifiée en supposant que la contrainte est constante à travers l'élément. Soit x^0 la moyenne des quatre coordonnées nodales :

$$\int_{\Omega} \sigma_{ij} \frac{\partial N_{\alpha}(x)}{\partial x_j} d\Omega \approx \sigma_{ij} \frac{\partial N_{\alpha}(x^0)}{\partial x_j} A \quad (3.20)$$

Le gradient de la vitesse peut être réécrit en termes de multiplication de matrices.

$$\left[\frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right] = B_{i j \alpha k} u_{\alpha k} \quad (3.21)$$

où B est une matrice de déformation, elle s'écrit en fonction des fonctions de forme. Elle relie les déplacements nodaux au vecteur déformation.

Le gradient du déplacement virtuel prend la même forme. Cela simplifie beaucoup l'évaluation des forces aux nœuds.

$$F_{\alpha k} = \sigma_{ij} B_{ij \alpha k} A \quad (3.22)$$

3.2.6 Etapes d'un pas Lagrangien

Les étapes d'un pas Lagrangien sont les suivantes :

1. Connaissant le champ de contraintes, la pression, les forces de hourglass, et la viscosité de choc à t^n dans chaque élément, les forces aux nœuds sont calculées. Les accélérations nodales sont calculées en divisant les forces nodales par les masses nodales [Benson, 1992].
2. Les accélérations sont intégrées pour donner le champ de vitesses à $t^{n+1/2}$.
3. Les vitesses sont intégrées pour donner les nouvelles positions des nœuds à t^{n+1} .
4. Les contraintes sont calculées à partir des vitesses précédentes, et l'équation constitutive est intégrée de t^n à t^{n+1} pour donner les forces internes.
5. Les forces de hourglass ajoutées aux forces internes sont calculées à partir de $u^{n+1/2}$.
6. Les énergies internes sont mises à jour de t^n à t^{n+1} .
7. Les pressions sont calculées à partir de l'équation d'état, en utilisant les densités et les énergies à t^{n+1} .
8. Un nouveau pas de temps est calculé en se basant sur la vitesse du son à travers chaque élément et sa géométrie.
9. Avancer la calcul d'un pas de temps et retour au pas 1.

3.3 Méthode Eulérienne

3.3.1 Equations régissantes

Les approches ALE sont basées sur un mouvement lié à un domaine de référence qui est introduit comme un troisième domaine (en plus du domaine du matériau et du domaine spatial), comme détaillé dans [Hughes et al., 1981]. Les équations régissantes dans des simulations simple-matériau et multi-matériaux sont équivalentes. Les différences existent au niveau numérique, où les éléments contenant plus qu'un matériau exigent

un traitement spécial. Les équations Eulériennes sont équivalentes aux équations ALE lorsque la vitesse du maillage est nulle ($u = 0$). La vitesse relative entre le fluide et la configuration de référence est par conséquent la vitesse du fluide : $w = v - u = v$.

$$\dot{f} = \frac{\partial f(x_i, t)}{\partial t} + v_i \frac{\partial f(x_i, t)}{\partial x_i} \quad (3.23)$$

En substituant l'équation (3.23) dans les équations de la section (3.2.1), on obtient les équations Eulériennes de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie.

L'équation de masse décrit l'évolution de la densité ρ comme une fonction de la divergence du champ de vitesse.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\rho \frac{\partial v_i}{\partial x_i} - v_i \frac{\partial \rho}{\partial x_i} \quad (3.24)$$

L'équation de la quantité de mouvement est donnée par l'équation (3.25).

$$\rho \frac{\partial v_i}{\partial t} = \sigma_{ij,j} + \rho b_i - \rho v_i \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \quad (3.25)$$

où σ_{ij} est le tenseur des contraintes de Cauchy.

$$\sigma_{ij} = -p \delta_{ij} + \mu (v_{i,j} + v_{j,i}) \quad (3.26)$$

où δ_{ij} est le symbole de Kronecker.

Ces dernières équations sont résolues grâce aux conditions aux limites et aux conditions initiales. Les conditions aux limites sont soit un déplacement spécifié, soit un contact, soit une traction.

$$x_i(X, t) = g_i(X, t) \quad \text{sur } \Gamma_1 \quad (3.27a)$$

$$(x_i^1 - x_i^2) \cdot n_i^1 \leq 0 \quad \text{sur } \Gamma_2 \quad (3.27b)$$

$$\sigma_{ij} n_j = \tau_i \quad \text{sur } \Gamma_3 \quad (3.27c)$$

n est le vecteur extérieur normal, et l'exposant désigne les différentes surfaces. Γ est la frontière entière du système, Γ_1 , Γ_2 et Γ_3 sont respectivement des conditions aux limites de déplacement, de contact et de traction.

L'équation de la conservation de l'énergie est donnée par l'équation suivante :

$$\rho \frac{\partial e}{\partial t} = \sigma_{ij} v_{i,j} + \rho b_i v_i - \rho w_j \frac{\partial e}{\partial x_j} \quad (3.28)$$

où e est l'énergie interne.

Puisque le matériau se déplace à travers un maillage fixe, des données additionnelles sont nécessaires pour décrire les contenus courants de chaque élément, et des calculs additionnels doivent être exécutés pour la mise à jour des données. Ces calculs qui décrivent le transport du matériau entre les éléments sont généralement plus chers que les calculs par la méthode Lagrangienne. Dans la littérature, les procédures Eulériennes et ALE peuvent être divisées en formulations ALE couplées et opérateur split. Dans la première formulation, les équations Lagrangiennes-Eulériennes sont résolues, pour lesquelles les vitesses des mailles et du matériau sont

entièrement couplées ([Liu et al., 1991], [Wang and Gadala, 1997]). Ces méthodes de résolution ont été développées à partir de la forme faible des équations Eulériennes. Les formes faibles des lois de la conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie sont respectivement données par les équations (3.29a), (3.29b) et (3.29c) qui correspondent respectivement aux équations (3.24), (3.25) et (3.28).

$$\int_{\Omega} \frac{\partial \rho}{\partial t} \delta \rho \, d\Omega = - \int_{\Omega} \rho \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \delta \rho \, d\Omega - \int_{\Omega} w_i \frac{\partial \rho}{\partial x_i} \delta \rho \, d\Omega \quad (3.29a)$$

$$\int_{\Omega} \rho \frac{\partial v_i}{\partial t} \delta v_i \, d\Omega = \int_{\Omega} (-\sigma_{ij} \frac{\partial \delta v_i}{\partial x_j} + \rho b_i \delta v_i) \, d\Omega - \int_{\Omega} \rho w_j \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \delta u_i \, d\Omega + \int_{\Gamma_2} \tau_i \delta v_i \, d\Gamma \quad (3.29b)$$

$$\int_{\Omega} \rho \frac{\partial e}{\partial t} \delta e \, d\Omega = \int_{\Omega} \left(\sigma_{ij} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \rho b_i v_i \right) \delta e \, d\Omega - \int_{\Omega} \rho w_j \frac{\partial e}{\partial x_j} \delta e \, d\Omega \quad (3.29c)$$

Dans la seconde approche, les équations Lagrangiennes-Eulériennes couplées sont divisées et résolues séparément. Cette méthode est convenable et efficace pour les calculs. Elle comporte deux étapes, un pas Lagrangien et un pas d'advection [Chorin et al., 1978]. Premièrement, le maillage suit les déformations du matériau dans un pas Lagrangien. Deuxièmement, la solution Lagrangienne est projetée du maillage Lagrangien sur le maillage initial pour un cas Eulérien, ou sur le maillage de référence pour un cas ALE.

Pratiquement, la plupart des hydrocodes, comme CEL [Noh, 1964], JOY [Couch, 1983], PISCES [Hancock, 1985], CSQ [Thompson, 1975], CTH [McGlaun, 1990], MESA [Holian, 1989], KRAKEN [DeBar, 1974], CALE [Tipton, 1992], CAVEAT [Addressio, 1992], DYNA2D [Benson, 1989], HEMP [Sharp and Barton, 1981], SALE [Amsden, 1980], et SALE3D [Amsden, 1981] ont des pas Lagrangiens et d'advection séparés. Dans la section suivante, cette approche sera présentée.

3.3.2 Méthode split

L'équation linéaire d'advection est un bon moyen de montrer comment l'opérateur split est utilisé dans les codes Eulériens.

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + c \frac{\partial \phi}{\partial x} = f \quad (3.30)$$

où ϕ est la variable, c est la vitesse d'écoulement, et f est la donnée. L'opérateur split divise l'équation (3.30) en deux équations qui sont résolues successivement. La première (l'équation Lagrangienne) contient la donnée f , et la seconde (l'équation Eulérienne) contient les termes convectifs.

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = f \quad (3.31a)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + c \frac{\partial \phi}{\partial x} = 0 \quad (3.31b)$$

Dans un hydrocode Eulérien, la première équation est résolue avec le même algorithme utilisé dans un code Lagrangien. Pour résoudre la seconde équation, le maillage est remis de sa position Lagrangienne à sa position initiale, et les volumes transportés entre les éléments adjacents sont calculés. Le transport de la masse, de l'énergie, de la quantité de mouvement, des contraintes, et d'autres caractéristiques est traité par des algorithmes d'advection. Des détails de ces algorithmes sont décrits en détail par certains auteurs : Benson [Benson, 1992r], Souli et al. [Souli et al., 2000] et Youngs [Youngs, 1982], où l'algorithme de la cellule donneuse, une méthode d'advection de premier ordre, et l'algorithme de Van Leer, une méthode d'advection de second ordre [Van Leer, 1977] sont utilisés.

3.3.2.1 Advection de la masse

Pour chaque face j de chaque élément, le flux est le volume du matériau se déplaçant d'un élément à un autre élément à travers la face j . Pour chaque élément, la nouvelle densité est calculée suivant l'advection suivante :

$$\rho_e \cdot V_e = \rho_l \cdot V_l + \sum_{faces} \rho_l^j \cdot Flux_j \quad (3.32)$$

où ρ_e est la densité de l'élément Eulérien, V_e est le volume de l'élément Eulérien, ρ_l est la densité de l'élément Lagrangien, V_l est le volume de l'élément Lagrangien, ρ_l^j est la densité de l'élément Lagrangien adjacent j , $Flux_j$ est le flux de volume à travers l'élément adjacent j .

3.3.2.2 Advection de la quantité de mouvement

La quantité de mouvement est utilisée pour le calcul des nouvelles vitesses nodales. Pour éviter la distribution de la quantité de mouvement des nœuds aux éléments durant l'advection, et des éléments aux nœuds durant les calculs des vitesses nodales, l'advection de la quantité de mouvement est effectuée seulement à travers les nœuds. Cette procédure exige un maillage décalé en fonction du maillage initial de telle façon que les centres des éléments du maillage original deviennent les nouveaux nœuds (cf. *figure 3.2*). Amsden et Hirt [Amsden and Hirt, 1973] ont développé le premier algorithme YAQUI pour construire un maillage décalé pour l'advection de la quantité de mouvement.

Les données nécessaires pour un algorithme d'advection sont le volume des mailles avant et après la phase Lagrangienne, les vitesses nodales, les masses nodales et les flux entre les mailles. Toutes les données sont prêtes sur le maillage décalé sauf les flux. Les valeurs des nouveaux flux sur le

maillage décalé sont définies en utilisant une distribution régulière des flux des faces d'éléments initiaux aux faces des nouveaux éléments.

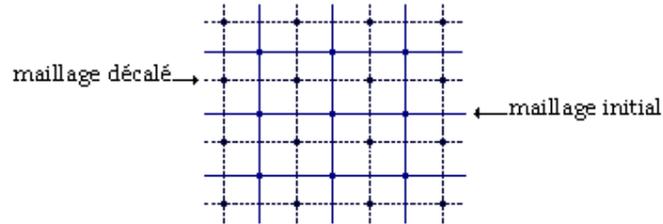


Figure 3.2 : Maillage initial et maillage décalé

1^{er} pas : Calculer la vitesse u de l'élément :

$$u_l^{elem} = \frac{1}{8} \sum_{j=1,8} u_l^j \quad (3.33)$$

Les mêmes calculs se font pour v et w .

2^{ème} pas : Calculer la quantité de mouvement :

$$M_l^{elem} = \rho_l^{elem} \cdot u_l^{elem} \quad (3.34)$$

3^{ème} pas : Calculer le nouveau flux de la quantité de mouvement de l'élément :

$$V_e \cdot M_e = V_l \cdot M_l + \sum_{j=1, \text{faces}} M_l^j \cdot Flux_j \quad (3.35)$$

$Flux_j$ sont les flux transportés à travers les éléments adjacents. Ces flux sont calculés en utilisant le maillage décalé. Le flux est positif si l'élément reçoit du matériau, et négatif si l'élément perd du matériau.

La nouvelle vitesse est calculée en utilisant la nouvelle masse nodale, et en distribuant la quantité de mouvement de l'élément aux 8 nœuds.

$$m_e^i u_e^i = m_l^i u_l^i + \frac{1}{8} \sum_{j=1,8} \Delta M_x^j \quad (3.36)$$

Les mêmes calculs se font pour v et w .

ΔM_x^j est la quantité de mouvement advectée de l'élément adjacent à travers la face j , et m_e^i est la masse nodale Eulérienne pour le nœud i .

$$m_e^i = \frac{1}{8} \sum_{j=1, elems} m_e^j \quad (3.37)$$

3.3.3 Algorithmes d'advection

3.3.3.1 Algorithme de la cellule donneuse

Les méthodes d'advection sont décrites en une dimension. L'algorithme de la cellule donneuse est une application de la méthode de Godunov du premier ordre appliquée aux équations d'advection. Soient les valeurs initiales de ϕ à gauche et à droite du nœud j sont respectivement $\phi_{j-1/2}^n$ et $\phi_{j+1/2}^n$.

$$\phi_{j+1/2}^{n+1} = \phi_{j+1/2}^n + \frac{1}{\Delta x} (f_j^\phi - f_{j+1}^\phi) \quad (3.38)$$

avec

$$f_j^\phi = \frac{a_j}{2} \Delta t (\phi_{j-1/2}^n + \phi_{j+1/2}^n) + \frac{|a_j|}{2} \Delta t (\phi_{j-1/2}^n - \phi_{j+1/2}^n) \quad (3.39)$$

où a_j est la vitesse de la discontinuité au nœud j .

Cette advection respecte les principales caractéristiques d'un algorithme d'advection puisqu'elle est stable, monotonique, conservative et simple. La valeur de f_j^ϕ dépend du signe de a au nœud j , qui définit le sens amont.

Si $a_j > 0$: $f_j^\phi = a_j \phi_{j-1/2}^n$

Si $a_j < 0$: $f_j^\phi = a_j \phi_{j+1/2}^n$

3.3.3.2 Algorithme de Van Leer

L'algorithme de Van Leer, connu aussi sous le nom d'algorithme MUSCL (Monotonic Upwind Scheme for Conservation Laws), utilise une relation des méthodes de Godunov de second ordre en améliorant les évaluations des valeurs initiales des états gauches et droites du problème de Riemann aux nœuds [Van Leer, 1977]. L'algorithme de la cellule donneuse suppose que la distribution de ϕ est constante à travers un élément. Van Leer remplace cette distribution constante par une distribution d'ordre supérieur, $\phi_{j+1/2}^n$. Une distribution linéaire par morceaux peut être utilisée:

$$\phi_{j+1/2}^n(x) = S_{j+1/2}^n (x - x_{j+1/2}^n) + \phi_{j+1/2}^n \quad (3.40)$$

où x est la coordonnée dans le volume de l'élément, $x_{j+1/2}^n$ est la coordonnée du centre de la maille et $S_{j+1/2}^n$ est la pente de la droite. Pour assurer la monotonicité, cette pente est limitée par :

$$S_{j+1/2}^n = \frac{1}{2} \{ \text{sgn}(S^L) + \text{sgn}(S^R) \} \min \left(|S^L|, |S_{j+1/2}^n|, |S^R| \right) \quad (3.41)$$

avec
$$s^L = \frac{1}{2\Delta x_{j+1/2}} (\phi_{j+1/2}^n - \phi_{j-1/2}^n) \quad (3.42)$$

$$s^R = \frac{1}{2\Delta x_{j+1/2}} (\phi_{j+3/2}^n - \phi_{j+1/2}^n) \quad (3.43)$$

et

$$s_{j+1/2}^n = \frac{(\phi_{j+3/2}^n - \phi_{j+1/2}^n)\Delta x_j^2 + (\phi_{j+1/2}^n - \phi_{j-1/2}^n)\Delta x_{j+1}^2}{\Delta x_{j+1} \Delta x_j (\Delta x_{j+1} + \Delta x_j)} \quad (3.44)$$

où

$$\Delta x_j = x_{j+1/2}^n - x_{j-1/2}^n \quad (3.45)$$

$s_{j+1/2}^n$ est une approximation au second ordre de la pente obtenue en interpolant les valeurs de ϕ aux centres des 3 mailles adjacentes par une parabole.

Un second minimum peut être envisagé en remplaçant respectivement les équations (3.42) et (3.43) par les équations (3.46) et (3.47).

$$s^L = \frac{\phi_{j+1/2}^n - \phi_{j-1/2}^n}{x_{j+1/2} - \left(x_j + \frac{1}{2} \max(0, a_j) \Delta t\right)} \quad (3.46)$$

$$s^R = \frac{\phi_{j+3/2}^n - \phi_{j+1/2}^n}{\left(x_{j+1/2} - \frac{1}{2} \min(0, a_{j+1}) \Delta t\right) - x_{j+1/2}} \quad (3.47)$$

Le flux au nœud j est alors évalué en utilisant un schéma similaire à la méthode de la cellule donneuse:

$$flux_j^\phi = \frac{a_j}{2} (\phi_j^- + \phi_j^+) + \frac{|a_j|}{2} (\phi_j^- - \phi_j^+) \quad (3.48)$$

avec

$$\phi_j^+ = S_{j+1/2}^n (x^c - x_{j+1/2}^n) + \phi_{j+1/2}^n \quad (3.49)$$

$$\phi_j^- = S_{j-1/2}^n (x^c - x_{j-1/2}^n) + \phi_{j-1/2}^n \quad (3.50)$$

et

$$x^c = x_j^n + \frac{1}{2} \Delta t a_j \quad (3.51)$$

3.4 Méthodes de suivi d'interface des surfaces

Une des tâches les plus difficiles d'une configuration Eulérienne multi-matériaux est de suivre adéquatement les interfaces de chaque matériau. Différentes approches ont été utilisées pour traiter ce problème. Les deux techniques généralement utilisées sont les techniques MAC (Marker And Cell) et VOF (Volume Of Fluid).

3.4.1 Méthode MAC

Dans la méthode MAC (Marker And Cell), proposée en 1965 par Harlow et Welch [Harlow and Welch, 1965], la position du fluide dans une grille est déterminée par un ensemble de marqueurs qui se déplacent avec le fluide. Ces derniers n'ont pas de propriétés physiques. Les mailles contenant des marqueurs sont considérées occupées par le fluide, alors que celles sans marqueurs sont vides. Une surface libre est définie comme étant n'importe quelle maille qui contient des particules et qui a également au moins une maille voisine qui est vide. Certains traitements spéciaux étaient exigés pour définir les propriétés des fluides dans des mailles qui se sont remplies, et pour annuler les valeurs dans des cellules qui sont devenues vides. La méthode MAC a résolu avec un grand succès une large variété de problèmes de surface libre non linéaires. Cependant, la méthode MAC a été utilisée principalement pour des simulations bidimensionnelles parce qu'elle exige une mémoire et un temps CPU considérables lorsque le

nombre de marqueurs devient important pour s'adapter au nombre nécessaire des particules des marqueurs. En moyenne, environ 16 marqueurs pour chaque maille est nécessaire pour assurer un suivi précis des surfaces subissant de grandes déformations.

3.4.2 Méthode SLIC

La technique SLIC (Simple Linear Interface Calculation) de Noh et Woodward [Noh and Woodward, 1976] décrit une méthode d'approximation géométrique d'interfaces des fluides. Les interfaces sont parallèles soit à l'axe X soit à l'axe Y.

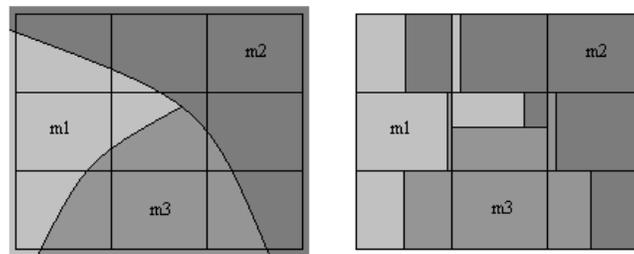


Figure 3.3 : Interfaces entre fluides dessinées par la méthode SLIC

3.4.3 Méthode VOF

La méthode VOF (Volume Of Fluid) est attractive pour résoudre un grand nombre de problèmes non-linéaires en mécanique des fluides et des solides. Cette méthode représente les interfaces plus précisément que la méthode SLIC. Elle a été introduite pour la première fois par Hirt et Nichols [Hirt and Nichols, 1981] dans un code appelé SOLA-VOF pour suivre les interfaces des matériaux dans un maillage Eulérien. L'objectif de

cette approche est d'avoir un dispositif de suivi du matériau plus puissant que la méthode MAC sans grande mémoire ni coût CPU cher. Dans chaque cellule, la quantité du fluide est déterminée en évaluant une quantité appelée fraction volumique. Cette fraction volumique comprise entre 0 et 1 détermine la position de l'interface des matériaux dans l'élément. Quand la cellule est remplie d'un fluide, la fraction volumique vaut 1. Quand la cellule est vide, ou remplie d'un autre fluide, la fraction volumique vaut 0. Il est possible de déterminer les limites physiques du domaine fluide dans un maillage à partir de la distribution de la fraction volumique d'un fluide.

La technique de Youngs [Youngs, 1982] calcule précisément la position de l'interface dans une cellule en se reposant sur les fractions volumiques des cellules voisines (*cf. figure 3.4*). Cette méthode décrit les interfaces par des segments de droite non parallèle aux axes. Soit f la fraction de volume dans une maille donnée, f_W , f_E , f_S et f_N les valeurs de f aux faces de la maille comme le montre la figure 3.5.

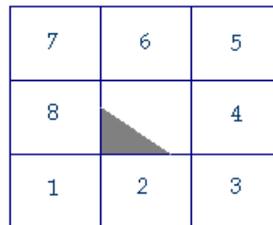


Figure 3.4 : Calcul des valeurs aux faces dans la méthode de Youngs

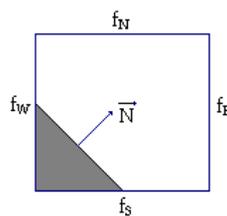


Figure 3.5 : Fractions volumiques des faces voisines utilisées par la technique de Youngs

Les valeurs aux faces sont calculées de la manière suivante:

$$f_w = \frac{(f_1 + 2f_8 + f_7)}{4} \quad f_E = \frac{(f_3 + 2f_4 + f_5)}{4} \quad f_N = \frac{(f_7 + 2f_6 + f_5)}{4} \quad f_s = \frac{(f_1 + 2f_2 + f_3)}{4} \quad (3.52)$$

L'interface dans une maille est tracée à l'aide de la normale extérieure et de la fraction volumique. La normale extérieure à l'interface : \vec{N} est calculée comme suit :

$$\vec{N} = -\frac{\vec{\nabla}f}{|\vec{\nabla}f|} \quad (3.53)$$

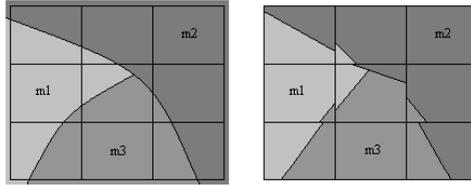


Figure 3.6 : Interfaces entre des fluides tracées par la technique VOF de Youngs

3.5 Etude numérique de la détonation de l'explosif C-4 dans l'air

L'objectif de cette étude est la modélisation de la détonation de l'explosif C-4 dans l'air (cf. figure 3.7) en utilisant le code de calculs par éléments finis LS-DYNA. La sphère explosive a un rayon de 4.07cm, une densité de 1.601g/cm³, et une vitesse de détonation de 0.804cm/μs. Sa pression de Chapman-Jouguet est 0.281Mbar, et son énergie initiale par unité de volume est 0.087Mbar. Le poids de l'explosif C-4 est 1lb. (454g). Des résultats expérimentaux fournis par la société "McDonnell Douglas Corporation" donnent l'historique de la pression à 5 pieds (152.4cm) du centre de l'explosif C-4. Dans cette section, deux méthodes seront appliquées pour la modélisation de cette détonation : les formulations Lagrangienne et Eulérienne multi-matériaux.

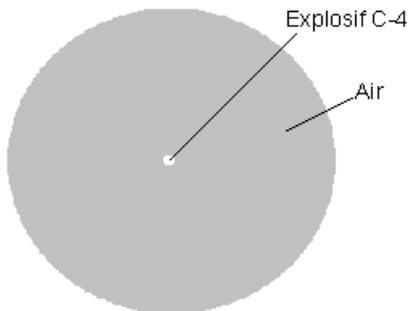


Figure 3.7 : Détonation de l'explosif C-4 dans l'air

L'équation d'état utilisée pour l'explosif C-4 est l'équation JWL discutée dans la section (2.4). L'air est modélisé comme un gaz idéal (équation 3.54). L'équation utilisée s'appelle l'équation d'état polynomiale linéaire. Cette équation permet de décrire le comportement de l'air, en tenant compte des effets de chocs forts.

$$p = (\gamma - 1) \frac{\rho}{\rho_0} E \quad (3.54)$$

où p est la pression, γ est coefficient d'expansion adiabatique ($\gamma = 1.4$), ρ est la densité, ρ_0 est la densité initiale ($\rho_0 = 1.293 \cdot 10^{-3} \text{g/cm}^3$), E_0 est l'énergie par unité de volume, donc son unité est celle de la pression ($E_0 = 2.5 \cdot 10^6 \text{Mbar}$). L'air est initialisé à une pression de 1bar.

L'explosif et l'air ont été modélisés avec des éléments de 8-nœuds. Le maillage a la forme d'un huitième de sphère puisqu'il y a 3 plans de symétrie. Le point de l'amorce est au centre de la sphère. Après la détonation, une onde de choc de grande vitesse part de la source explosive vers l'air qui l'entoure. L'air est modélisé par une sphère de rayon 170cm. Les calculs ont été effectués jusqu'à ce que les événements significatifs ont pris place dans l'air près de l'explosif, soit à $t=2750\mu\text{s}$.

3.5.1 Résultats numériques en utilisant la méthode Lagrangienne

Dans cette section, nous présentons les résultats numériques obtenus en utilisant la formulation Lagrangienne. Dans ce modèle, 6966 nœuds et 4768 éléments ont été utilisés.

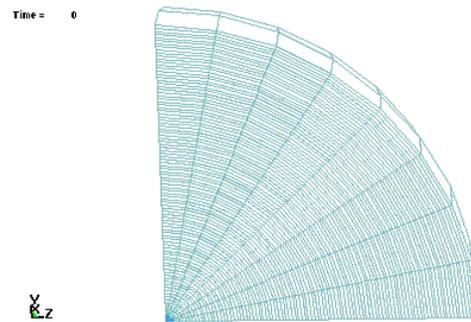


Figure 3.8a : Maillage à $t = 0\mu\text{s}$

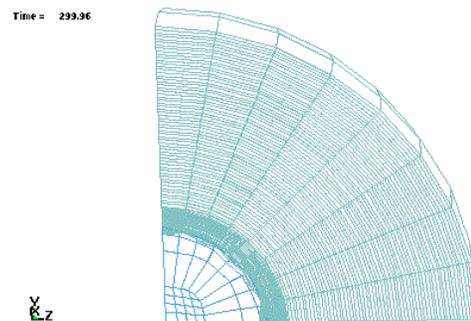


Figure 3.8b : Maillage Lagrangien à $t=300\mu\text{s}$

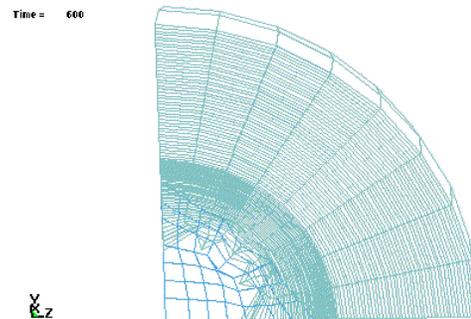


Figure 3.8c : Maillage Lagrangien à $t=600\mu s$

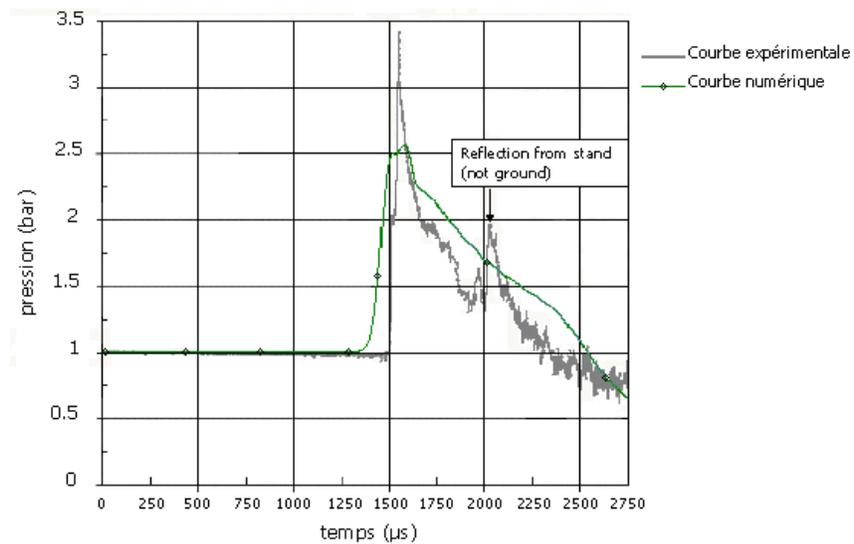


Figure 3.9 : Courbes expérimentale et numérique obtenue en utilisant la formulation Lagrangienne de l'historique de la pression à 5 pieds de l'explosif

Les figures (3.8b) et (3.8c) montrent que les mailles subissent de grandes déformations. La Figure (3.9) donne l'historique expérimental de la pression à 5 pieds de l'explosif. La courbe expérimentale montre une

augmentation brutale de la pression à $t=1500\mu\text{s}$, et un pic de pression de l'ordre de 3.40 bars. En utilisant la formulation Lagrangienne, nous avons obtenu une surpression de l'ordre de 2.55 bars, ce qui donne une erreur relative d'environ 25%. De même, le temps d'arrivée de l'onde explosive, obtenu numériquement, ne correspond pas au temps réel retrouvé expérimentalement. Ces résultats numériques montrent que la formulation Lagrangienne n'est pas adaptée à des problèmes de grandes déformations telle que la détonation.

3.5.2 Résultats numériques en utilisant la méthode Eulérienne multi-matériaux

La méthode Eulérienne multi-matériaux a été appliquée afin d'éviter les inconvénients de grandes déformations des mailles liées à la méthode Lagrangienne. La figure (3.10) montre le modèle Eulérien utilisé, où le nombre d'éléments utilisés est 56916, et le nombre des nœuds est 76515. La figure (3.11) montre l'expansion de la pression à $t=1500\mu\text{s}$. La simulation numérique donne une surpression égale à 3 bars (cf. Figure 3.13), ce qui donne une erreur relative de l'ordre de 11.76% par rapport à la surpression mesurée expérimentalement. Ces résultats montrent que la formulation Eulérienne multi-matériaux donne de bons résultats par rapport à la méthode Lagrangienne pour ce genre de problèmes.

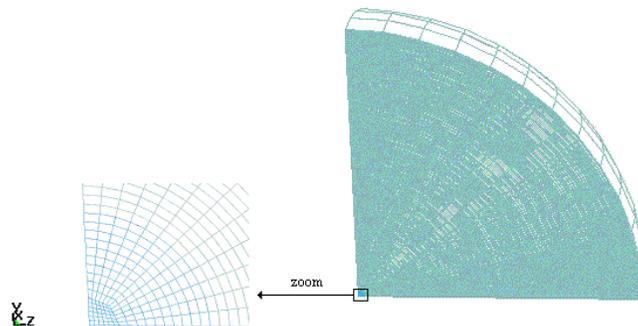


Figure 3.10 : Modèle Eulérien utilisé

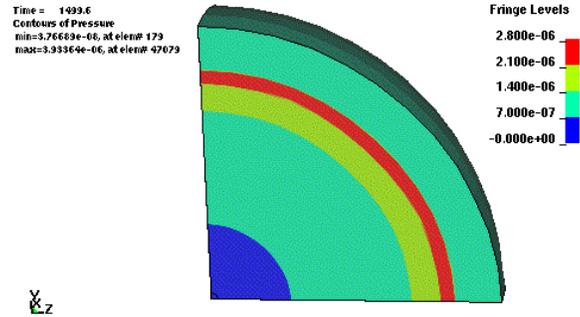


Figure 3.11 : Expansion de la pression à $t=1500\mu s$

Sur la figure (3.12), nous présentons la courbe de la surpression calculée numériquement en fonction de la distance par rapport au centre de la charge statique.

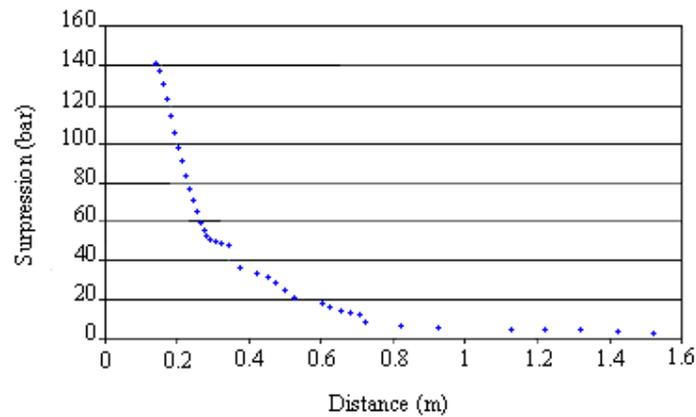


Figure 3.12 : Courbe de la surpression en fonction de la distance par rapport à l'explosif

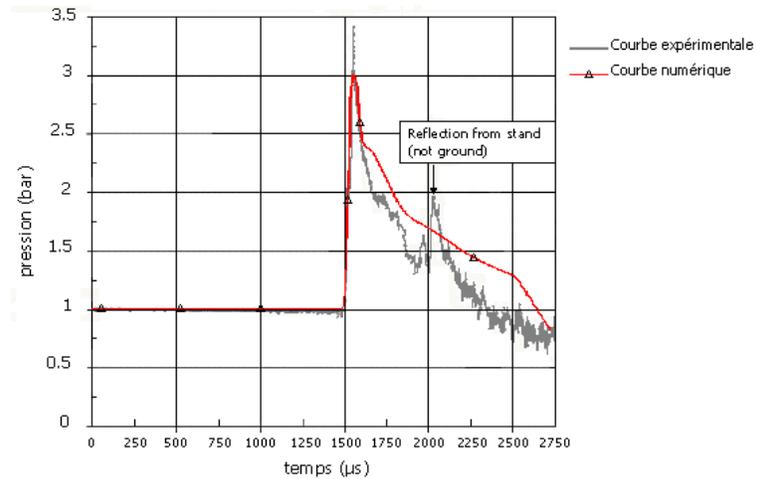


Figure 3.13 : Courbes expérimentale et numérique obtenue en utilisant la formulation Eulérienne multi-matériaux de l'historique de la pression à 5 pieds de l'explosif

3.6 Modélisation d'une détonation avec réflexion d'onde de choc de l'explosif C-4 dans l'air en utilisant la méthode Eulérienne multi-matériaux

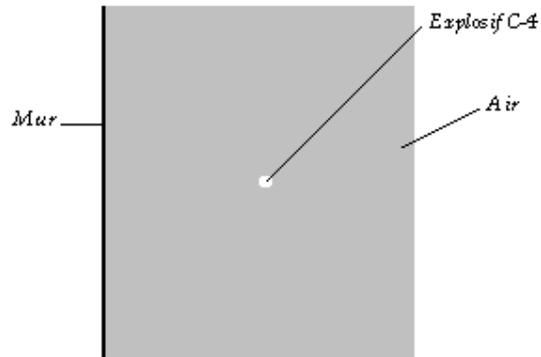


Figure 3.14 : Détonation de l'explosif C-4 dans l'air dans le cas d'une réflexion d'onde

Dans ce cas, l'onde de choc est réfléchiée par un mur placé à 4 pieds (121.92cm) de l'explosif (cf. Figure 3.14). L'objectif est de retrouver numériquement l'historique de la pression à 5 pieds de 0.5lb. (227g) de l'explosif C-4, et de le comparer avec les résultats expérimentaux. Le rayon de l'explosif est 3.23cm. L'explosif a été modélisé avec des éléments à 8-nœuds. En utilisant deux plans de symétrie, un quart de la sphère a été considéré (cf. figure 3.15). Le nombre d'éléments utilisés est 216648, équivalents à 235718 nœuds.

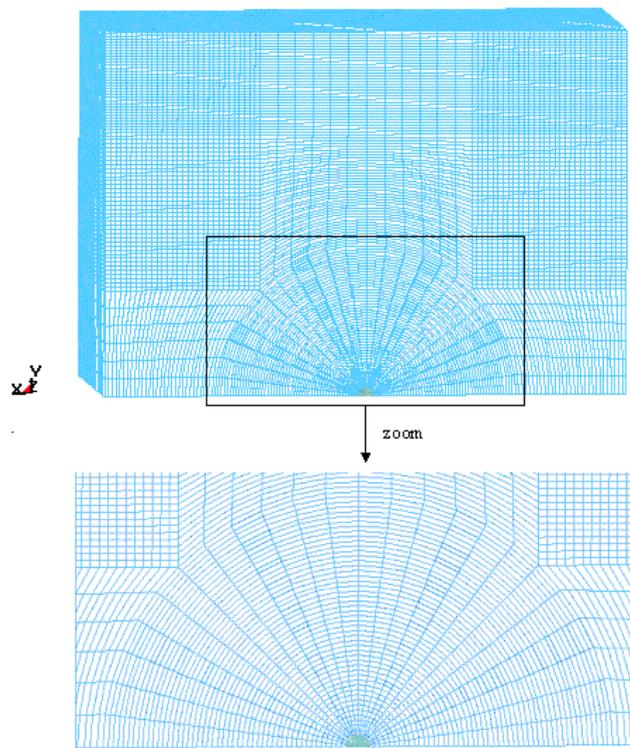


Figure 3.15 : Modélisation d'une explosion de l'explosif C-4 dans l'air dans le cas d'un mur

Les figures (3.17) et (3.18) montrent respectivement la propagation d'onde de choc avant et après sa réflexion à travers le mur. Les résultats expérimentaux donnant l'historique de la pression à 5 pieds de l'explosif sont présentés sur la figure (3.16). Après le premier pic, un second pic dû à la réflexion de l'onde sur le mur apparaît. La courbe numérique obtenue en utilisant l'approche Eulérienne multi-matériaux est présentée sur la même figure afin de permettre de comparer les résultats numériques aux résultats expérimentaux. Expérimentalement, la valeur du premier pic de la pression est 2.20bars. Numériquement, la surpression est égale à 2.19 bars (erreur relative : 0.45%) (cf. Figure 3.16). Le second pic de la pression est 1.20 bar dans le cas expérimental, et 1.26 bar dans le cas numérique (erreur relative : 5 %).

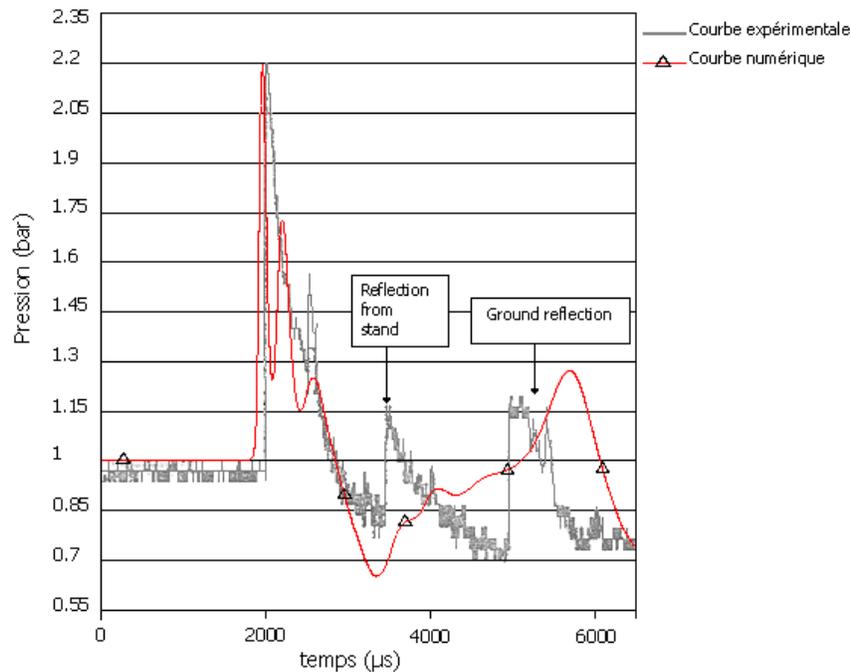


Figure 3.16 : Courbes expérimentale et numérique obtenue en utilisant la formulation Eulérienne multi-matériaux de l'historique de la pression à 5 pieds de l'explosif dans le cas d'une réflexion d'onde de choc

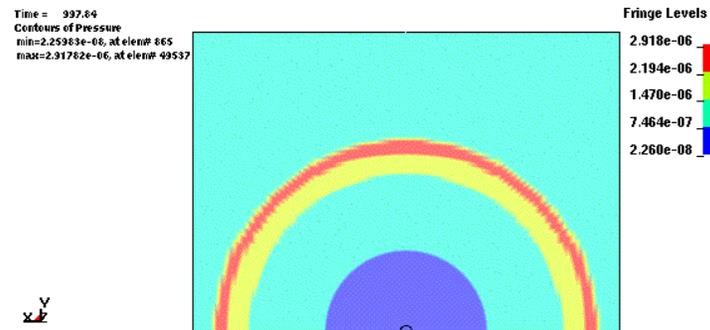


Figure 3.17 : Pression avant réflexion d'onde de choc ($t=1\text{ms}$)

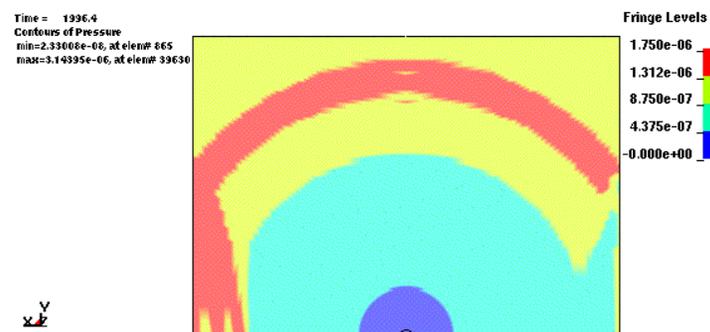


Figure 3.18 : Pression après réflexion d'onde de choc ($t=2\text{ms}$)

3.7 Etude numérique d'onde de choc produite par un cordeau détonant en forme spirale

Ces dernières années, les ondes de choc issues d'explosions dans l'eau sont de plus en plus employées pour créer de nouvelles techniques industrielles. Il est donc nécessaire de bien contrôler l'onde de choc dans l'eau pour répondre aux demandes industrielles. Ces contrôles incluent la

convergence d'ondes de choc dans l'eau par des techniques appropriées [Itoh et al., 1994]. Pour démontrer le processus de la convergence d'une onde de choc dans l'eau près du centre d'une spirale, Itoh et al. [Itoh et al., 2000] ont réalisé une étude expérimentale dont l'objectif était de comparer les pressions obtenues dans l'eau en utilisant différentes formes géométriques du cordeau détonant, et étudier le processus de la convergence d'onde d'une corde spirale.

D'autre part, la nécessité des modélisations numériques de ces phénomènes est devenue de plus en plus primordiale. Nous avons réalisé une étude numérique dont le but est de remplacer ces expériences difficiles et coûteuses par un calcul numérique. L'outil numérique utilisé est la méthode Eulérienne multi-matériaux. En utilisant le code de calculs par éléments finis LS-DYNA, une bonne conformité entre les résultats numériques et expérimentaux permettra de valider la possibilité de la formulation Eulérienne multi-matériaux à résoudre précisément les problèmes de propagation d'ondes de choc du cordeau détonant sous différentes formes. Avant de présenter la partie numérique, nous présentons dans la section suivante le processus expérimental réalisé par Itoh et al. [Itoh et al., 2000].

3.7.1 Etude expérimentale

Le cordeau détonant est un matériau explosif flexible et non électrique. Il a un cœur de tetranitrate de pentaerythritol (PETN), un des plus forts explosifs connus, couvert de différentes épaisseurs de fils de cotons et fibres synthétiques. Le processus de convergence de l'onde de choc des formes désignées du cordeau détonant a été observée photographiquement en utilisant une caméra rapide. Deux intervalles de temps de $2\mu\text{s}$ et $5\mu\text{s}$ ont été choisis pour deux photographies successives. Ces photographies confirment que l'onde de choc dans l'eau converge à travers le centre de la spirale. La pression à côté du centre de la spirale a été mesurée expérimentalement à une distance $D_h = 50\text{ mm}$ par des capteurs de la pression. Comparé au cordeau détonant placé sous une forme droite, un

pic de pression 3 fois plus grand est obtenu dans le cordeau détonant en forme spirale [Itoh et al., 2001].

3.7.1.1 Conception de la forme spirale

Le processus de convergence de l'onde de choc dans l'eau dépend de la conception géométrique du cordeau détonant, i.e. la forme de la corde spirale est importante. Cette section donne le principe de la détermination de cette conception. Comme décrit sur la figure (3.19), le cordeau détonant est mis sous la forme d'une spirale commençant par le point P_1 . Quand le cordeau détonant est amorcé à ce point, les ondes de choc s'étalent progressivement vers les points suivants, $P_2 - P_n$. Si les ondes de choc dans l'eau sont capables d'arriver simultanément au centre de la spirale du point O , la convergence d'onde de choc est obtenue.

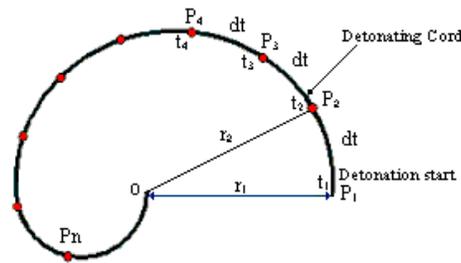


Figure 3.19 : Modèle de la spirale

La photographie de balayage de fente (streak) et la méthode d'ombroscopie (shadowgraph) ont été utilisées pour avoir la relation entre la distance et le temps parcourus par l'onde de choc sous l'eau. Une caméra à balayage de fente est un appareil qui permet de mesurer des phénomènes lumineux ultra-rapides, et de les représenter en fonction du temps. C'est l'instrument de détection directe de lumière qui donne une bonne résolution temporelle. Son principe est de transformer la variation temporelle du signal lumineux

à mesurer en une répartition spatiale qui peut être enregistrée à l'aide d'une caméra CCD (Charge Coupled Device). Le schéma de l'observation optique pour la photographie de balayage de fente est montré sur la figure (3.20). Comme indiqué sur cette figure, le cordeau détonant a été placé dans un réservoir fait de polyméthacrylate de méthyle (PMMA), rempli d'eau. Une fente a été placée au centre du cordeau détonant, et l'onde de choc sous l'eau a été observée par la fente par une caméra rapide. Puisque le film dans la caméra se déplace vers la gauche avec une vitesse constante, le processus parcouru dans la fente par l'onde de choc est obtenu comme le montre la figure (3.21). On peut obtenir la relation entre la distance parcourue par l'onde de choc sous l'eau et le temps en faisant un traitement d'images pour cette photographie. Les données obtenues peuvent être rapprochées en utilisant l'équation (3.55), calculée par la méthode non linéaire d'ajustement de courbes [Hamashima et al., 2003].

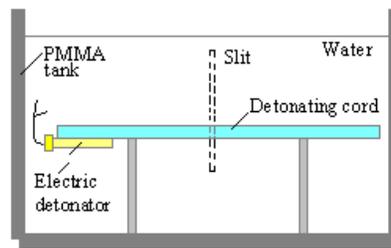


Figure 3.20 : Schéma d'observation optique utilisée dans la photographie de balayage de fente

Le point P_1 est supposé comme le premier point de détonation. Ses coordonnées sont $(X_1, 0)$. La distance entre les points O et P_1 est notée r_1 . Le temps mis par l'onde de choc sous l'eau pour traverser la distance r_1 à partir de P_1 est résolu par l'expression suivante en remplaçant n par 1 :

$$r_n = A_1(1 - e^{-B_1 t_n})D + A_2(1 - e^{-B_2 t_n})D + C t_n \quad (3.55)$$

où : $A_1 = 15.150E-6$ (s), $B_1 = 4.711E+3$ (s), $A_2 = 1.920E-6$ (s), $B_2 = 0.102E+6$ (1/s),
 C est la vitesse du son de l'eau ($C = 1489$ (m/s)), et D est la vitesse de
 détonation du cordeau détonant utilisé ($D = 6308$ (m/s)).

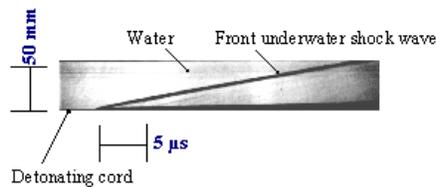


Figure 3.21 : Photographie de balayage de fente

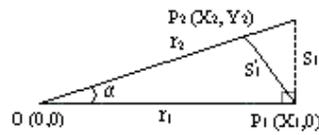


Figure 3.22 : Modèle de calcul

Le temps exigé pour que la détonation traverse la distance S_1 le long du
 cordeau détonant est donné par :

$$S_1 = D dt \quad (3.56)$$

Comme montré sur la figure (3.22), S_1 et r_1 sont perpendiculaires. Puisque
 S_1 est assez petit, l'angle α peut être exprimé comme suit :

$$\alpha = S_1 / r_1 \quad (3.57)$$

La distance de propagation d'onde de choc sous l'eau, r_2 , au temps $t_2 = t_1 - dt$
 peut être trouvée en remplaçant t_1 par t_2 dans la formule (3.55). En plus, soit

S'_1 la distance entre les points $P_2 (X_2, Y_2)$ et $P_1 (X_1, 0)$, les coordonnées de P_2 peuvent être trouvées dans les équations (3.58) et (3.59).

$$X_2 = r_2 \cos \alpha \quad (3.58)$$

$$Y_2 = r_2 \sin \alpha \quad (3.59)$$

Puisque l'angle α est très petit, les deux longueurs S'_1 et S_1 sont presque égales. Donc, la distance de propagation d'onde de détonation, S_1 , dans le temps dt peut être remplacée par S'_1 . Les coordonnées des points, $P_3 \sim P_n$ peuvent être résolues par les mêmes procédures décrites ci-dessus jusqu'à $t_{n+1} = t_n - dt = 0$. Comme indiqué sur la figure (3.19), puisque $t_1 = t_2 + dt = t_3 + 2dt = t_4 + 3dt = \dots = ndt$, est le temps quand la détonation arrive au point O, l'onde de choc sous l'eau produite aux points $P_1 \sim P_n$ arrive simultanément au point O. Cela signifie que l'onde de choc sous l'eau converge au centre de la spirale.

3.7.1.2 Etude photographique et mesure de la pression

La figure (3.23) montre un schéma de diagramme pour l'observation optique [Asanuma, 1977], [Itoh et al., 1995]. Comme montré sur cette figure, le cordeau détonant est transformé en une géométrie spirale. Le cordeau détonant est fixé sur une plaque PMMA (250×200×5mm), et l'ensemble est placé dans un réservoir d'eau. Le cordeau détonant utilisé dans les expériences a un diamètre de 5.3 mm. La caméra utilisée est le convertisseur d'image HADLAND PHOTONICS, IMACON790. Pour parvenir à la synchronisation, l'explosion amorcée par le détonateur électrique et le début du flash sont contrôlés par un générateur de retard (HADLAND PHOTONICS, THREE CHANNEL DELAY GENERATOR). Le contrôle du début de la photographie a été réalisé par des capteurs d'ionisation qui ont été montés avec le détonateur électrique et le cordeau détonant.

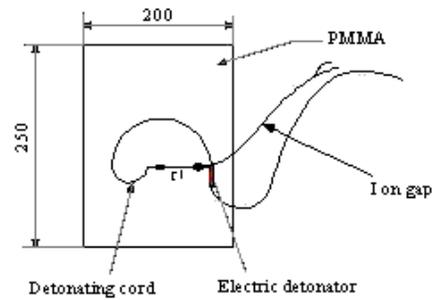


Figure 3.23 : Outil d'observation optique

La figure (3.24) montre le système de mesure de la pression. Le capteur de pression et le cordeau détonant sont placés dans un réservoir d'eau. Le signal du capteur est converti par un oscilloscope pour obtenir la forme d'onde. Trois séries d'expériences sont incluses : type droit, type spiral et type circulaire. Les pressions des trois expériences sont comparées.

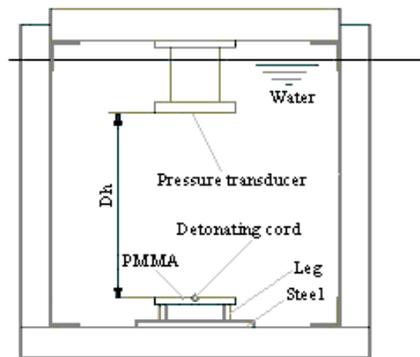


Figure 3.24 : Outil de mesure de la pression

3.7.1.3 Résultats expérimentaux

Les figures (3.25a) et (3.25b) montrent les photographies à images intégrales (framing photographs) d'onde de choc accompagnant l'explosion dans l'eau du cordeau détonant en forme spirale. Les photographies sur les figures (3.25a) et (3.25b) ont respectivement un temps inter-frame de $5\mu\text{s}$ et $2\mu\text{s}$.

Les pressions ont été mesurées à une distance D_h égale à 50 mm. Les historiques des pressions sont présentées dans la section (3.7.2). Elles seront comparées aux résultats numériques (cf. figures 3.32, 3.34, 3.36 et 3.38). Différentes formes et longueurs du cordeau détonant ont été étudiées (cf. tableau 3.1). La figure (3.26a) présente la pression maximale pour chaque cas. Elle montre que les formes spirales donnent des pressions maximales plus grandes que celles des formes circulaires et droites. Par exemple, la pression maximale dans le cas 3 (539.3MPa) est presque trois fois plus grande que celle du cas 1 (176.5MPa). La comparaison de l'impulsion de trois types du cordeau détonant montre que l'impulsion d'une forme circulaire (cas 4) est la valeur la plus grande (cf. figure 3.26b).

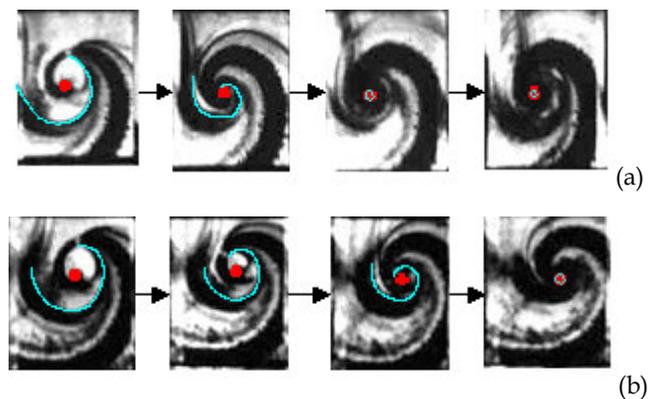


Figure 3.25 : Photographie à images intégrales

Forme du cordeau détonant		Longueur du cordeau détonant	Dh
(1) DROITE		250mm	50mm
SPIRALE	(2) r1= 60mm	250mm	50mm
	(3) r1=100mm	400mm	50mm
(4) CERCLE		250mm	50mm

Tableau 3.1 : Différents cas du cordeau détonant étudié

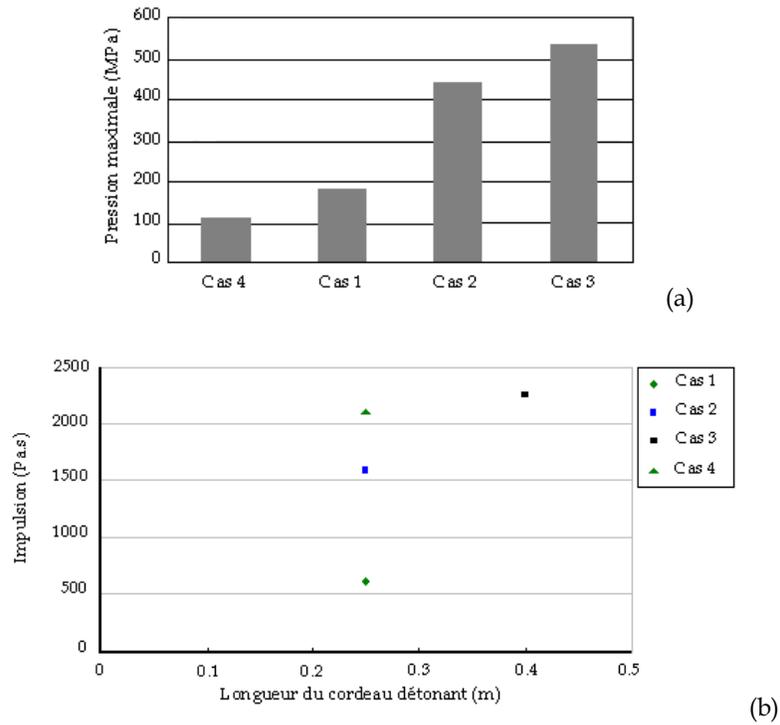


Figure 3.26 : Pressions maximales et impulsions

3.7.2 Etude numérique

3.7.2.1 Modèles utilisés

Le cas 1, présenté sur la figure 3.27, a été discrétisé en trois dimensions en 287745 éléments de 8-noeuds et 319200 noeuds. L'amorce de l'explosion est appliquée au point $O(2.3485, 0, 0)$. La position de la pression mesurée est montrée sur la figure (3.27).

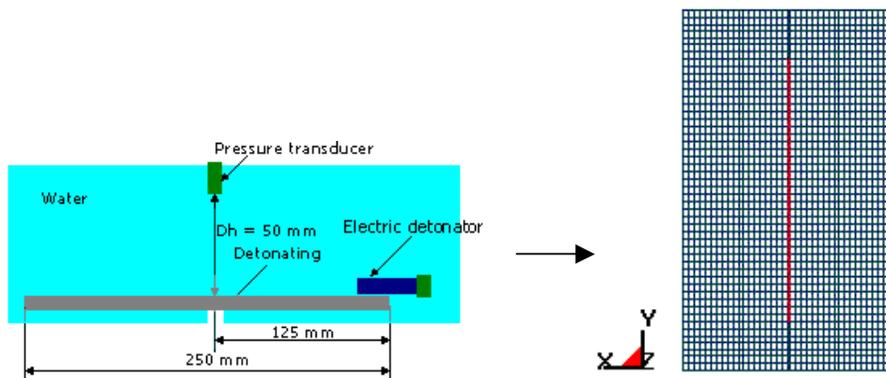


Figure 3.27 : Modèle du cas 1, forme droite

Les Figures (3.28) et (3.29) présentent respectivement les modèles des cas 2 et 3. L'amorce de l'explosion est appliquée au point $O(59, 0, 0)$ pour le cas 2, et $O(99, 0, 0)$ pour le cas 3. La figure (3.30) présente le modèle du cas 4, où le cordeau détonant est en forme circulaire. L'amorce de l'explosion est appliquée au point $O(36.7145, 0, 0)$.

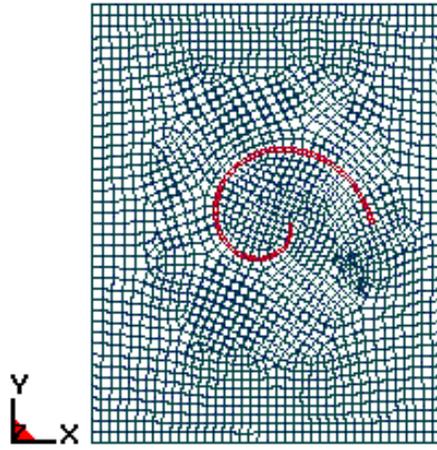


Figure 3.28 : Modèle du cas 2, forme spirale

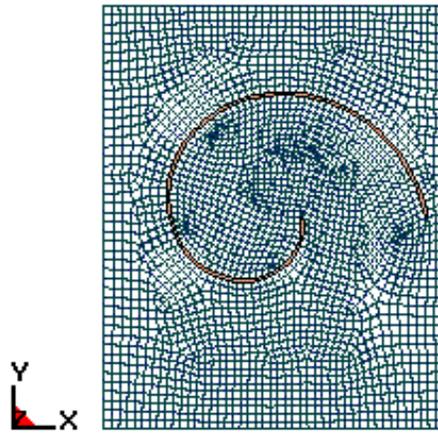


Figure 3.29 : Modèle du cas 3, forme spirale

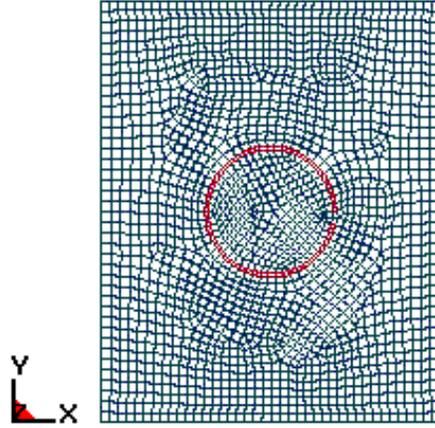


Figure 3.30 : Modèle du cas 4, forme circulaire

3.7.2.2 Equation d'état Jones-Wilkins-Lee-Baker (JWL)

L'équation d'état thermodynamique Jones-Wilkins-Lee-Baker (JWL) permet la représentation précise du comportement P-V des explosifs. Cette équation d'état a été récemment développée par Baker, et elle est décrite par Orosz [Hallquist, 1998]. Sa forme est basée sur la forme Jones-Wilkins-Lee (JWL) présentée dans la section (2.4). Des termes additionnels expérimentaux et un paramètre variable de Grüneisen ont été ajoutés pour décrire adéquatement la région de grande pression. Cette relation peut être exprimée comme suit :

$$p = \sum_{i=1}^5 A_i \left(1 - \frac{\lambda}{R_i V}\right) e^{-R_i V} + \frac{\lambda E}{V} + C \left(1 - \frac{\lambda}{\omega}\right) V^{-(\omega+1)} \quad (3.60)$$

où le paramètre Grüneisen λ est représenté comme suit :

$$\lambda = \sum_{i=1}^5 A_i (A_{\lambda i} V + B_{\lambda i}) e^{-R_i V} + \omega \quad (3.61)$$

où V est le volume relatif et $A_i, R_i, A_{\lambda i}, B_{\lambda i}, R_{\lambda i}, C$, et ω sont des constantes. Pour le cordeau détonant étudié, ces constantes sont définies dans le tableau (3.2).

A1 (Mbar)	A2 (Mbar)	A3 (Mbar)	A4 (Mbar)	R2	R1	R3	R4
521.96	71.104	4.4774	0.97725	8.7877	44.169	25.072	2.2251
C (Mbar)	ω	$A\lambda 1$	$B\lambda 1$	$R\lambda 1$	$A\lambda 2$	$B\lambda 2$	$R\lambda 2$
0.0157	0.32357	12.257	52.404	43.932	8.6351	-4.9176	2.1303

Tableau 3.2 : Paramètres JWL B du cordeau détonant

3.7.2.3 Equation d'état Mie-Grüneisen utilisée pour l'eau

Dans cette étude, L'eau utilise l'équation d'état Mie-Grüneisen en utilisant les paramètres présentés dans le tableau (3.3). Cette équation est linéaire [Benson, 1992], et peut être écrite comme la somme de deux fonctions A_1 et A_2 .

$$p(e, \rho) = A_1(\rho) + A_2(\rho)E \quad (3.62)$$

L'équation d'état Mie-Grüneisen définit la pression des matériaux comprimés comme suit :

$$p = \frac{\rho_0 C^2 \mu \left[1 + \left(1 - \frac{\gamma_0}{2} \right) \right] \mu}{1 - (S - 1)\mu} + \gamma_0 E \quad (3.63)$$

où C est le point d'intersection de l'axe de la vitesse du choc u_s avec la courbe $u_p - u_s$, u_p étant la vitesse des particules derrière le front de choc. S est le coefficient de la pente de la courbe $u_s - u_p$ ($u_s = C + S u_p$), γ_0 est gamma initial de Grüneisen et $\mu = (\rho / \rho_0) - 1$.

ρ_0 (g/cm ³)	γ_0	C (mm/ μ s)	S
1.00	0.1	148	1.92

Tableau 3.3 : Paramètres de Grüneisen pour l'eau

3.7.2.4 Résultats numériques

Dans cette section, nous présentons les résultats numériques pour les différents cas de l'explosion sous l'eau du cordeau détonant. Les historiques des pressions à $D_h=50\text{mm}$ en utilisant la formulation Eulérienne multi-matériaux sont présentés sur les figures (3.32), (3.34), (3.36) et (3.38). Les figures (3.31a) et (3.31b) obtenues numériquement correspondent respectivement aux figures expérimentales (3.25a) et (3.25b). Les figures (3.31a) et (3.31b) ont respectivement un temps inter-trame de 5 μ s et 2 μ s. Ces figures montrent numériquement la convergence de l'onde de choc sous l'eau en utilisant un cordeau détonant en forme spirale.

Cas 1. L'historique de la pression à $D_h=50\text{mm}$, obtenu en utilisant la formulation Eulérienne multi-matériaux, est montré sur la figure (3.32). Sur la même figure, La courbe expérimentale est présentée afin de comparer les deux courbes. La surpression mesurée expérimentalement est de l'ordre de 176.5MPa, et la valeur du pic numérique est 175.88MPa. La figure (3.33) montre la propagation de la pression à $t=12\mu$ s, 24μ s et 36μ s.

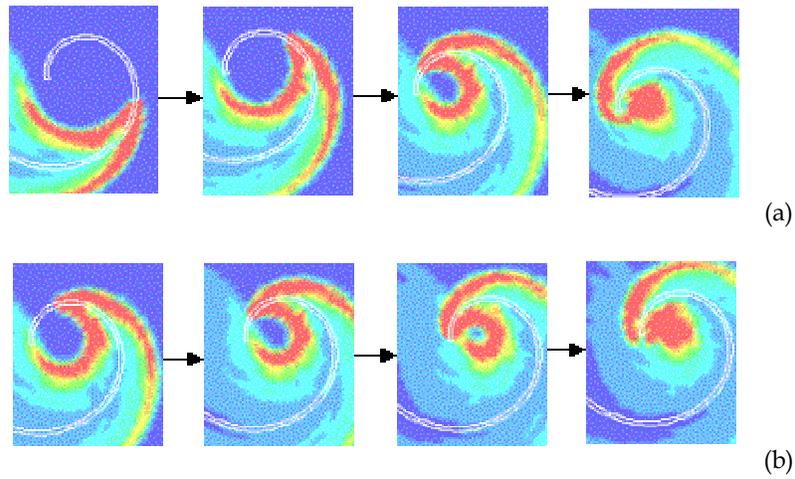


Figure 3.31 : Convergence d'onde de choc

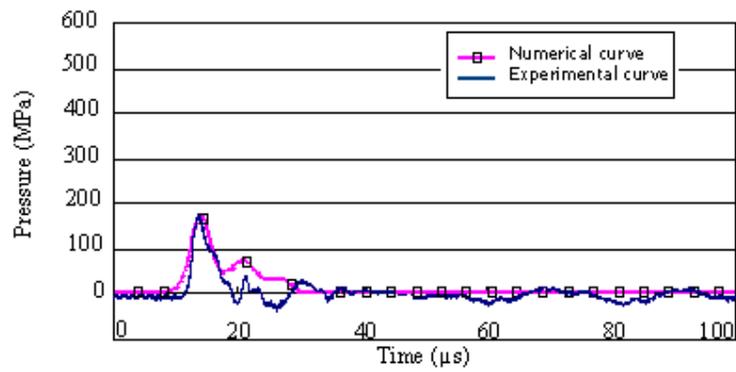


Figure 3.32 : Courbes numérique et expérimentale pression-temps à $D_h=50\text{mm}$, cas 1

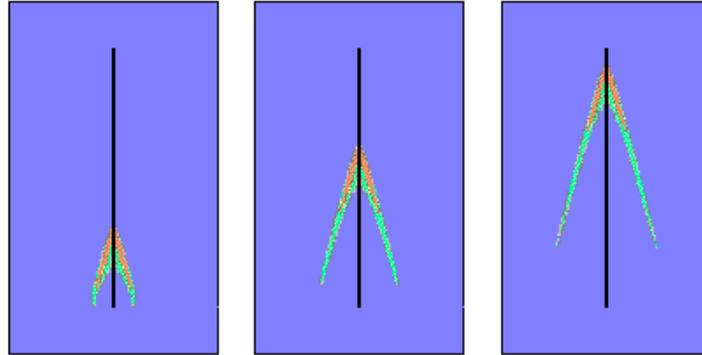


Figure 3.33 : Profil de pression à $t=12\mu s$, $24\mu s$ et $36\mu s$

Cas 2. Le profil de pression à $D_h=50\text{mm}$ pour laquelle le cordeau détonant a une forme spirale, est montré sur la figure (3.34). La courbe expérimentale est présentée sur la même figure. La surpression mesurée expérimentalement est 440MPa , et la surpression dans le cas numérique est 440.92MPa . La figure (3.35) montre la propagation de la pression à $t=10\mu s$, $20\mu s$ et $30\mu s$.

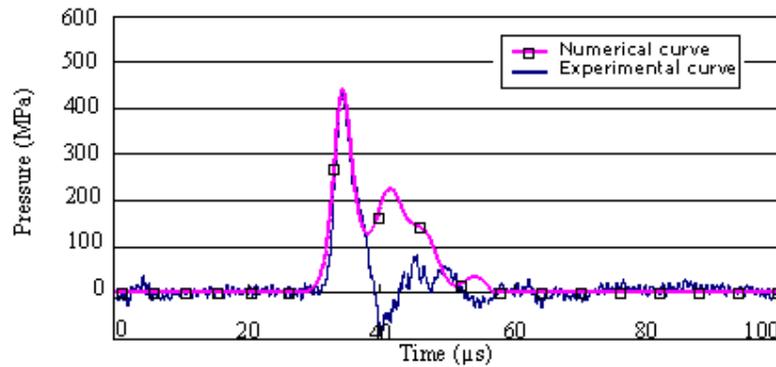


Figure 3.34 : Courbes numérique et expérimentale pression-temps à $D_h=50\text{mm}$, cas 2

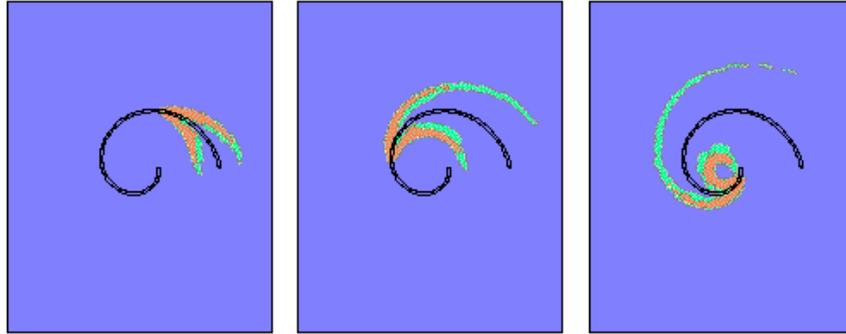


Figure 3.35 : Profil de pression à $t=10\mu\text{s}$, $20\mu\text{s}$ et $30\mu\text{s}$

Cas 3. Comme montré sur la figure (3.36), la courbe expérimentale et l'historique de la pression pour le cas numérique sont superposés. La valeur expérimentale du pic est 539.5MPa , et la surpression dans le cas numérique est 550.6MPa . La figure (3.37) montre la propagation de la pression à $t=18\mu\text{s}$, $36\mu\text{s}$ et $54\mu\text{s}$.

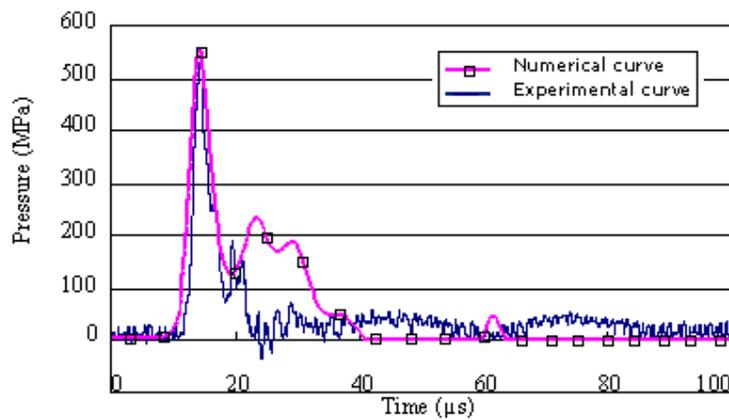


Figure 3.36 : Courbes numérique et expérimentale pression-temps à $D_h=50\text{mm}$, cas 3

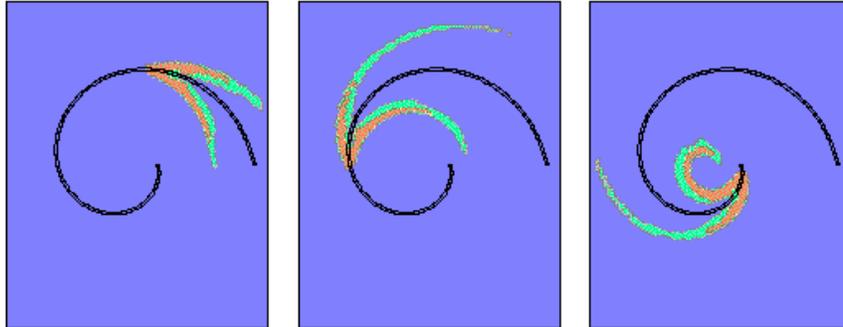


Figure 3.37 : Profil de pression à $t=18\mu\text{s}$, $36\mu\text{s}$ et $54\mu\text{s}$

Cas 4. La figure (3.38) montre la courbe expérimentale et la courbe numérique de la pression à $D_h=50\text{mm}$ pour laquelle le cordeau détonant à une forme circulaire. Dans ce cas, la surpression dans le cas expérimental est 109.3MPa , et la surpression calculée numériquement est 106.77MPa . La figure (3.39) montre la propagation de la pression à $t=12\mu\text{s}$, $24\mu\text{s}$ et $36\mu\text{s}$.

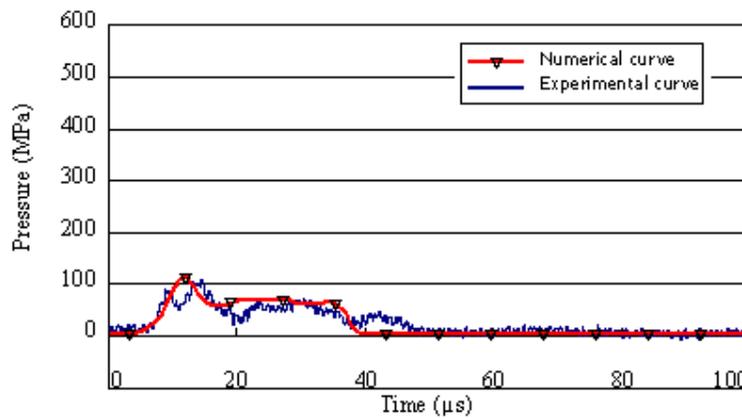


Figure 3.38 : Courbes numérique et expérimentale pression-temps à $D_h=50\text{mm}$, cas 4

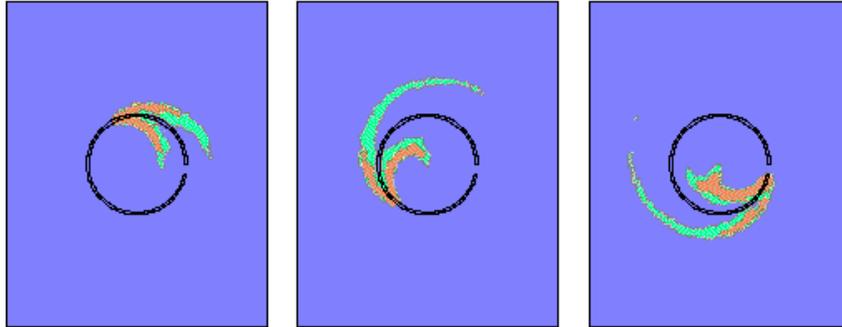


Figure 3.39 : Profil de pression à $t = 12\mu\text{s}$, $24\mu\text{s}$ et $36\mu\text{s}$

Dans le tableau (3.4), un récapitulatif des surpressions dans le cas numérique et expérimentale est présenté. Pour les quatre cas étudiés, les erreurs relatives sont inférieures à 2.5%. Ces résultats montrent que la formulation Eulerienne multi-matériaux est en accord avec les résultats expérimentaux.

	Surpression (MPa) Cas 1	Surpression (MPa) Cas 2	Surpression (MPa) Cas 3	Surpression (MPa) Cas 4
Résultats expérimentaux	176.5	440	539.5	109.3
Résultats numériques	175.88	440.92	550.6	106.77
Erreurs Relatives (%)	0.35	0.20	2.05	2.31

Tableau 3.4 : Tableau récapitulatif des résultats numériques et expérimentaux de la détonation du cordeau détonant

3.8 Conclusion

Les investigations numériques présentées dans ce chapitre ont permis de démontrer d'une manière générale les capacités de la méthode Eulérienne multi-matériaux à simuler des problèmes de détonation dans l'air et dans l'eau. Dans la première application, la propagation d'ondes de choc de l'explosif C-4 dans l'air a été modélisée avec succès. La comparaison entre l'étude expérimentale et la simulation numérique de l'historique de la pression à 5 pieds de l'explosif donne une bonne corrélation. La seconde étude a permis de modéliser la détonation de l'explosif C-4 dans l'air dans le cas d'une réflexion d'onde de choc sur un mur. Les résultats numériques comparés aux résultats des expériences prouvent la capacité de cette méthode à modéliser les phénomènes de réflexion des ondes de choc. La troisième étude démontre que l'onde de choc sous l'eau du cordeau détonant en forme spirale converge au centre de la spirale, ce qui permet d'avoir une pression de choc plus importante que la pression de Chapman-Jouguet. La comparaison des valeurs de la surpression à $D_h=50\text{mm}$ pour différents cas révèle une erreur relative inférieure à 2.5%. Par conséquent, la formulation Eulérienne multi-matériaux peut prédire l'historique de la pression de la détonation sous l'eau du cordeau détonant sous différentes formes.

Cependant, la formulation Eulérienne multi-matériaux n'est pas sans inconvénients numériques. Il y a les erreurs de dissipation liées à l'advection. En plus, le maillage doit occuper l'espace complet où le matériau sera situé lors de la simulation, et un grand nombre d'éléments doit être utilisé afin d'avoir un maillage fin. Ce calcul est numériquement cher. En combinant les techniques multi-matériaux avec la formulation ALE, il devient possible de forcer le maillage à se raffiner dans la région qui présente un intérêt, ainsi le flux de masse et la taille des mailles peuvent être minimisés. Le chapitre suivant traitera l'application de la méthode ALE à la propagation d'ondes de choc.

Chapitre 4

Résolution numérique des détonations par la méthode ALE multi-matériaux et la nouvelle méthode de relaxation retardée des mailles introduite dans la méthode ALE multi-matériaux

4.1 Introduction

Un bon algorithme de déplacement du maillage permet de traiter facilement des frontières mobiles, des surfaces libres, et des grandes déformations telles que les problèmes d'impact et de pénétration, la mécanique de la rupture, et l'analyse des détonations. La méthode Arbitraire Lagrange Euler (ALE) est une méthode de relaxation partielle des mailles qui permet aux mailles de limiter les grandes distorsions. C'est une approche qui combine les méthodes Lagrangiennes et Eulériennes pour bénéficier des avantages de chacune de ces deux techniques. Cette approche est capable de contrôler la géométrie des mailles indépendamment de la géométrie du matériau, et de créer un nouveau maillage non distordu, i.e. les distorsions des mailles doivent être remises à un niveau acceptable. Les algorithmes de relaxation utilisés dans la plupart des codes explicites sont des combinaisons linéaires des méthodes équipotentielles, moyenne simple et volume moyen, comme décrit dans [Souli et al., 2000]. Cette méthode a déjà été utilisée par plusieurs auteurs, et dans divers domaines, tels que l'industrie de l'automobile, le domaine biomédical, les applications d'interaction fluide-structure, et les problèmes

de pénétration et d'impact à grande vitesse. Hughes et al. [Hughes et al., 1981] et Liu et al. [Liu et al., 1988] ont utilisé la formulation ALE pour résoudre des problèmes des surfaces libres pour des écoulements visqueux incompressibles. Belytschko et al. [Belytschko et al., 1982] l'ont utilisée pour traiter des problèmes d'interaction fluide-structure. Une analyse des méthodes des éléments finis ALE a été présentée par Donea [Donea, 1983]. Hughes et al. [Hughes et al., 1986] ont développé la méthode de diffusion - ligne de courant (ou streamline upwind Petrov-Galerkin) qui a été implémentée dans la formulation ALE par Liu et al. [Liu et al., 1988]. Un travail précédent basé sur la méthode de Galerkin a été présenté par Brooks et Hughes [Brooks and Hughes, 1982]. La formulation ALE a été appliquée aussi pour l'analyse du ballonnement de fluide à l'intérieur d'un réservoir [Souli and Zolesio, 2001].

Cependant, dans la méthode des éléments finis, la qualité de la solution dépend fortement de la taille du maillage. Pour des problèmes de grandes pressions, la méthode ALE multi-matériaux classique ne permet pas de maintenir un maillage fin à proximité d'ondes de choc. A proximité des fronts de choc, le comportement de la nouvelle méthode de relaxation retardée des mailles introduite dans la méthode ALE multi-matériaux est très proche d'un comportement Lagrangien au front de choc, tout en limitant les distorsions des mailles à un niveau acceptable. Cela permet d'une part d'améliorer la qualité de la solution, et d'autre part d'optimiser le coût de l'étude en ne réduisant les tailles des mailles qu'à proximité du choc.

Dans ce chapitre, la technique ALE multi-matériaux a été d'abord appliquée pour étudier la détonation de l'explosif C-4 dans l'air. Ensuite, la nouvelle méthode de relaxation retardée des mailles introduite dans la méthode ALE multi-matériaux a été introduite pour résoudre des problèmes de dynamique rapide. Cette méthode sera appliquée aussi à la détonation de l'explosif C-4 dans l'air dans le cas de la réflexion d'onde. Pour chaque cas, les résultats numériques seront comparés aux résultats expérimentaux. Dans cette méthode, on utilise un paramètre de relaxation η qui influence le comportement du maillage. La courbe des valeurs numériques de la surpression en fonction du paramètre de relaxation η

permettra de mieux comprendre l'influence de ce paramètre sur le comportement du maillage. Dans le paragraphe suivant, la méthode ALE et ses différents algorithmes seront présentés.

4.2 Equations régissantes de la méthode ALE

Dans la formulation ALE, les équations régissantes sont posées dans un système qui peut se déplacer indépendamment du mouvement du matériau. Quelques définitions sont nécessaires pour comprendre comment ce choix du système de référence influence l'apparence des équations régissantes. Soit x est une coordonnée spatiale, X est une coordonnée du matériau, la vitesse spatiale du système de référence est notée $v_R(x,t)$, t est le temps, et $v(x,t)$ est la vitesse du matériau. La vitesse relative entre une particule et le système de référence est notée $w(x,t)$. Les équations Eulériennes peuvent être déduites des équations ALE en supposant que la vitesse du maillage est nulle ($v_R=0$). La vitesse relative entre le fluide et la configuration de référence est par conséquent la vitesse du fluide ($w = v$). La formulation Lagrangienne est obtenue si $w = 0$.

$$w(x,t) = v(x,t) - v_R(x,t) \quad (4.1)$$

$$\dot{f} = \frac{\partial f(x_i,t)}{\partial t} + w \frac{\partial f(x,t)}{\partial x_i} \quad (4.2)$$

Dans une formulation ALE, l'équation (4.2) doit être résolue pour toutes les variables d'état. Dans un système de référence, l'équation de masse s'écrit :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\rho \frac{\partial v_i}{\partial x_i} - w_i \frac{\partial \rho}{\partial x_i} \quad (4.3)$$

où ρ est la densité.

L'équation de la quantité de mouvement est donnée par :

$$\rho \frac{\partial v_i}{\partial t} = \sigma_{ij,j} + \rho b_i - \rho w_j \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \quad (4.4)$$

où σ_{ij} est le tenseur des contraintes de Cauchy.

$$\sigma_{ij} = -p \delta_{ij} + \mu (v_{i,j} + v_{j,i}) \quad (4.5)$$

où δ_{ij} est le symbole de Kronecker.

Ces dernières équations sont résolues grâce aux conditions aux limites (cf. équations 3.27a, b et c).

L'équation de l'énergie est donnée par :

$$\rho \frac{\partial e}{\partial t} = \sigma_{ij} v_{i,j} + \rho b_i v_i - \rho w_j \frac{\partial e}{\partial x_j} \quad (4.6)$$

où $b(x,t)$ est la force externe par unité de masse, et $e(x,t)$ est l'énergie interne par unité de volume.

4.3 Algorithmes de lissage

Il y a plusieurs combinaisons d'algorithmes de lissage pour les nœuds intérieurs et extérieurs. Décider où déplacer les nœuds est une étape très difficile de point de vue implémentation. Différents algorithmes de relaxation sont utilisés dans les hydrocodes. L'algorithme équipotentiel a été développé par Winslow [1990] dans LS-DYNA. Il est stable pour un grand nombre de problèmes. Autres méthodes ALE purement

géométriques sont utilisées. Parmi ces méthodes, l'algorithme de la moyenne simple, et l'algorithme de volume pondéré. Ces algorithmes sont combinés avec l'algorithme équipotentiel en utilisant des facteurs d'échelle pour chaque algorithme [Souli et al., 2000].

4.3.1 Algorithme Equipotentiel

L'algorithme équipotentiel basé sur le travail de Winslow [Winslow, 1963] est l'une des méthodes de lissage qui ont été utilisées avec succès. Un algorithme pour résoudre l'inverse de l'équation de Laplace a été développé par Winslow. Cette méthode vise à égaliser les volumes des éléments, et elle ajuste les endroits des nœuds. Par conséquent, la méthode équipotentielle peut prendre un temps très long pour converger, ou elle peut être divergente. Imposer un équipotentiel lisse sur chaque élément à chaque itération rend le calcul typiquement cher. Les nœuds des frontières se déplacent tangentiellement aux frontières avant que les mailles intérieures soient lisses. La forme inverse de l'équation de Laplace dans trois dimensions est donnée par :

$$\nabla^2 \xi = 0 \quad (4.7)$$

où $\xi = (\xi_1, \xi_2, \xi_3)$ sont des coordonnées curvilignes qui satisfont l'équation de Laplace.

L'équation (4.7) est résolue pour les coordonnées $x(\xi_i)$, $(i=1,2,3)$ des lignes des mailles. On les inverse de sorte que les coordonnées géométriques $x=(x_1, x_2, x_3)$ deviennent des variables dépendantes, et les coordonnées curvilignes ξ_i , $(i=1,2,3)$ deviennent des variables indépendantes. Par les méthodes de changement de variables, on obtient :

$$\alpha_1 \partial_{\xi_1 \xi_1} x + \alpha_2 \partial_{\xi_2 \xi_2} x + \alpha_3 \partial_{\xi_3 \xi_3} x + 2\beta_1 \partial_{\xi_1 \xi_2} x + 2\beta_2 \partial_{\xi_2 \xi_3} x + 2\beta_3 \partial_{\xi_1 \xi_3} x = 0 \quad (4.8)$$

où

$$\alpha_i = \partial_{\xi_i} x_1^2 + \partial_{\xi_i} x_2^2 + \partial_{\xi_i} x_3^2 \quad i=1, 2, 3 \quad (4.9)$$

$$\beta_1 = (\partial_{\xi_1 x} \cdot \partial_{\xi_3 x}) (\partial_{\xi_2 x} \cdot \partial_{\xi_3 x}) - (\partial_{\xi_1 x} \cdot \partial_{\xi_2 x}) \partial_{\xi_3 x}^2 \quad (4.10)$$

$$\beta_2 = (\partial_{\xi_2 x} \cdot \partial_{\xi_1 x}) (\partial_{\xi_3 x} \cdot \partial_{\xi_1 x}) - (\partial_{\xi_2 x} \cdot \partial_{\xi_3 x}) \partial_{\xi_1 x}^2 \quad (4.11)$$

$$\beta_3 = (\partial_{\xi_3 x} \cdot \partial_{\xi_2 x}) (\partial_{\xi_1 x} \cdot \partial_{\xi_2 x}) - (\partial_{\xi_3 x} \cdot \partial_{\xi_1 x}) \partial_{\xi_2 x}^2 \quad (4.12)$$

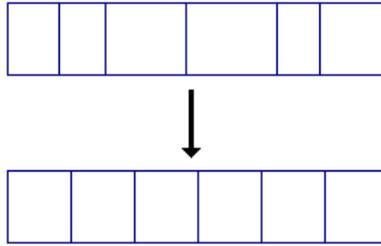


Figure 4.1 : Déplacement des nœuds avec l'algorithme équipotentiel

4.3.2 Algorithme de la moyenne simple

Dans cet algorithme, les coordonnées d'un nœud sont obtenues par un simple calcul de la moyenne des coordonnées des nœuds entourant ce nœud. La nouvelle position du nœud est donnée par :

$$x_{SA}^{n+1} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i^n \quad (4.13)$$

En le combinant avec l'algorithme équipotentiel, cet algorithme permet aux nœuds des frontières de s'adapter au nouveau maillage créé par l'algorithme équipotentiel. Cette combinaison a été utilisée avec succès dans LS-DYNA pour un grand nombre de problèmes, y compris des problèmes d'impact, et des problèmes d'explosions sous-marines en utilisant une formulation ALE.

4.3.3 Algorithme de Kikuchi

L'algorithme de volume pondéré, proposé par Kikuchi, utilise la moyenne des volumes des coordonnées des centres des éléments entourant un nœud. D'abord, on définit les coordonnées du centre de l'élément :

$$x_{\alpha}^n = \frac{1}{8} \sum_{i=1}^N x_i^n \quad (4.14)$$

La nouvelle position du nœud est donnée par :

$$x_k^{n+1} = \frac{\sum_{\alpha=1}^M V_{\alpha} x_{\alpha}^n}{\sum_{i=1}^M V_{\alpha}} \quad (4.15)$$

4.3.4 Combinaison des algorithmes de lissage

Les trois algorithmes précédents peuvent être utilisés simultanément avec différents facteurs d'échelle. Soit w_E , w_{SA} et w_K des facteurs d'échelle, utilisés respectivement pour l'algorithme équipotentiel, algorithme de la moyenne simple et algorithme de volume pondéré. Cette méthode utilise la moyenne des trois algorithmes cités ci-dessus.

$$x_{ale} = w_{SA} x_{sa} + w_K x_k + w_E x_E \quad (4.16)$$

4.4 Modélisation d'une détonation de l'explosif C-4 dans l'air en utilisant la formulation ALE multi-matériaux

Dans ce cas, 12519 nœuds et 8560 éléments ont été utilisés. Les facteurs d'échelle w_E , w_{SA} et w_K ont été pris égaux. En comparant la figure 4.3 avec les figures 3.8b et 3.8c, il apparaît que la méthode ALE nous a permis de garder un maillage régulier. La figure 4.4 montre la propagation de la pression à $t=1600\mu s$, et la figure 4.5 montre l'historique de la pression à 5 pieds de l'explosif. Cette figure montre une très bonne corrélation entre les courbes numérique et expérimentale de la pression. La surpression calculée numériquement est de l'ordre de 3.41 bars, donnant ainsi une erreur relative de 0.29%. Cependant, les calculs se sont arrêtés à $t= 2344.5 \mu s$, où le pas de temps est devenu très faible.

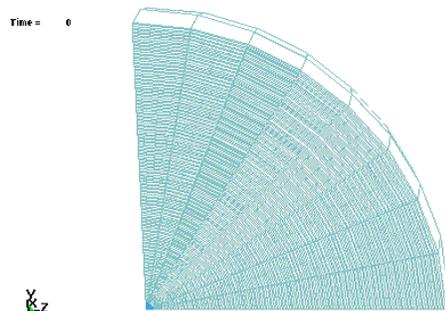


Figure 4.2 : Modèle ALE multi-matériaux à $t=0\mu s$

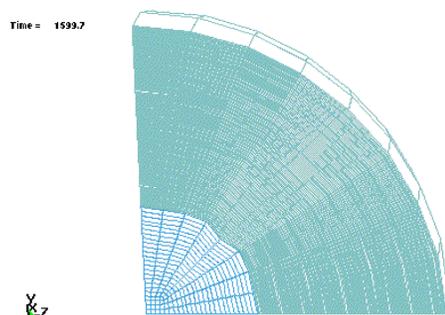


Figure 4.3 : Modèle ALE multi-matériaux à $t=1600\mu s$

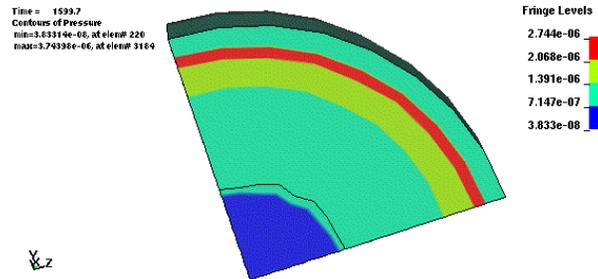


Figure 4.4 : Propagation de la pression à $t=1600\mu\text{s}$ en utilisant la méthode ALE multi-matériaux

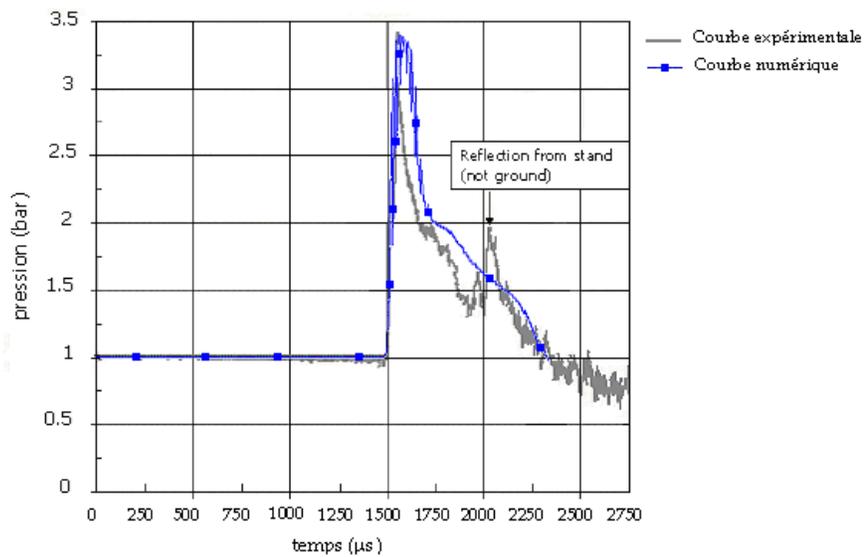


Figure 4.5 : Courbes expérimentale et numérique en utilisant la formulation ALE multi-matériaux de l'historique de la pression à 5 pieds de l'explosif

Un bon système de relaxation devrait limiter les distorsions des mailles à un niveau acceptable, tout en permettant le maillage d'être fin à proximité d'ondes de choc. Dans le paragraphe suivant, la méthode de relaxation

retardée des mailles qui permet d'avoir un maillage raffiné au front de choc sera testée.

4.5 Technique de relaxation retardée des mailles introduite dans la méthode ALE multi-matériaux

La technique de relaxation retardée des mailles introduite dans les méthodes ALE multi-matériaux permet d'avoir des mailles fines à proximité d'ondes de choc. Cette propriété a essentiellement deux effets positifs : Premièrement, le maillage devient fin dans des régions de grands gradients de pression, ce qui est avantageux pour la précision des calculs. Deuxièmement, la minimisation des flux d'advection dans des régions de grands gradients de pression réduit les erreurs de dissipation et de dispersion liées à la phase d'advection.

Cette technique se compose de deux phases : une phase Lagrangienne et une phase de relaxation des mailles. Elle sera testée dans les deux cas de détonation de l'explosif C-4 dans l'air (sans et avec mur).

4.5.1 Phase Lagrangienne

Dans un cycle d'une phase Lagrangienne, la solution est avancée de t^n à t^{n+1} . Les vitesses sont calculées à $t^{n+1/2}$ et les accélérations et les coordonnées sont calculées à t^{n+1} . A la fin d'un pas de temps, la solution au début du pas de temps $t^n, t^{n-1/2}$ est écrasée par la solution à $t^{n+1}, t^{n+1/2}$.

Connaissant la masse m d'un nœud et la force f^n , l'accélération est calculée comme suit :

$$a^n = \frac{f^n}{m} \quad (4.17)$$

Lorsque l'accélération est calculée, la vitesse de matériau peut être mise à jour de t^n à t^{n+1} .

$$v^{n+\frac{1}{2}} = v^{n-\frac{1}{2}} + a^n \Delta t^{n+\frac{1}{2}} \quad (4.18)$$

où

$$\Delta t^{n+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} (\Delta t^n + \Delta t^{n+1}) \quad (4.19)$$

Donc, la coordonnée Lagrangienne à t^{n+1} est calculée.

$$x^{n+1} = x_R^n + v^{n+\frac{1}{2}} \Delta t^{n+1} \quad (4.20)$$

x^{n+1} est la coordonnée mise à jour du nœud Lagrangien à t^{n+1} , et x_R^n est la coordonnée du nœud après la phase d'advection à t^n . Dans une formulation Lagrangienne, il n'y a pas de modification des coordonnées du nœud durant la relaxation des mailles : $x_R^n = x^n$.

4.5.2 Phase de relaxation des mailles

Pour des problèmes de grandes déformations, une phase de relaxation des mailles est nécessaire pour éviter un pas de temps très faible et, éventuellement, un jacobien négatif de certains éléments. La description Eulérienne est un cas spécial de la formulation ALE, où la maille est déplacée à sa configuration initiale, $x_R^n = x^0$. Une bonne méthode devrait, si possible, ne pas exiger de résoudre un grand système d'équations à chaque pas de temps. Cela retarde chaque cycle, et diminue les avantages d'un système explicite d'intégration de temps. La méthode proposée dans cette partie n'exige aucun système d'équations, et elle est facile à être implémentée dans les codes d'éléments finis existants. La méthode est une simple fonction qui agit sur la configuration produite par un système

arbitraire de relaxation. Pour mieux capter la physique du problème à proximité du front de choc, la fonction retarde la relaxation des mailles.

$$x_R^{n+1} = x^{n+1} + \eta (\bar{x}_R^{n+1} - x^{n+1}) \Delta t^{n+1} \quad (4.21)$$

\bar{x}_R^{n+1} est une coordonnée de nœud produit par un algorithme de relaxation des mailles agissant sur la configuration Lagrangienne à t^{n+1} , et η est un paramètre de relaxation. La vitesse au temps $n+1/2$ devient :

$$v_R^{n+\frac{1}{2}} = v^{n+\frac{1}{2}} + \eta (\bar{x}_R^{n+1} - x^{n+1}) \quad (4.22)$$

4.6 Modélisation d'une détonation de l'explosif C-4 dans l'air en utilisant la méthode de relaxation retardée des mailles

La technique de relaxation retardée des mailles a été appliquée au phénomène de la détonation de l'explosif C-4 dans l'air afin de comparer cette méthode aux autres méthodes déjà utilisées, en se référant aux résultats expérimentaux. Un total de 35914 nœuds et 26892 éléments a été utilisé. L'historique de la pression est montré sur la figure 4.6. On constate que l'historique de la pression de la méthode de relaxation retardée des mailles est très proche de l'historique de la pression dans le cas expérimental. La courbe présente une augmentation brutale de la pression à $t=1500\mu s$, donnant une surpression numérique de 3.40 bars.

La figure 4.7 montre que les mailles sont raffinées dans la région de gradients de grandes pressions. Loin de l'onde de choc, les mailles sont relaxées d'une façon proche de leurs configurations initiales. La figure 4.8 montre la surpression en fonction du paramètre de relaxation η . Cette figure montre que la valeur du paramètre η doit être le plus proche possible de 0 (μs^{-1}). Dans cette courbe, pour η supérieur à 0.1 (μs^{-1}), la

courbe devient presque horizontale. Quand η est proche de 1 (μs^{-1}), le comportement de cette technique est presque Eulérien.

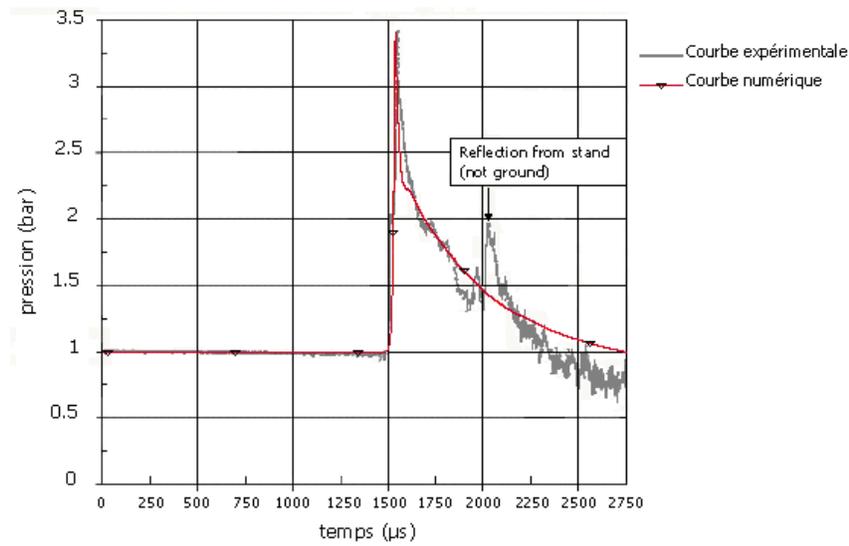


Figure 4.6 : Courbes expérimentale et numérique en utilisant la formulation de relaxation retardée des mailles de l'historique de la pression à 5 pieds de l'explosif

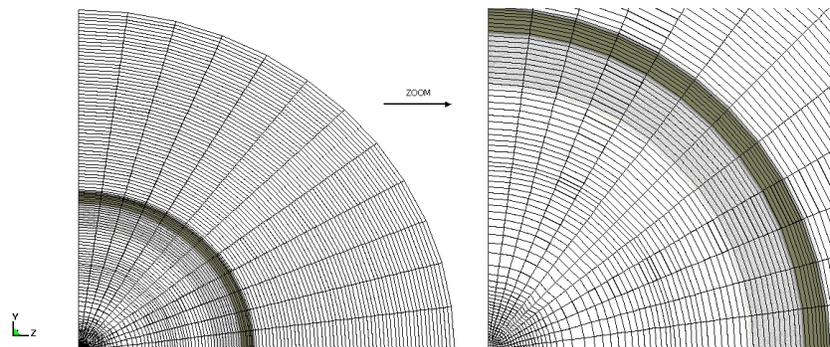


Figure 4.7 : Détonation de l'explosif C-4 à $t=400 \mu\text{s}$

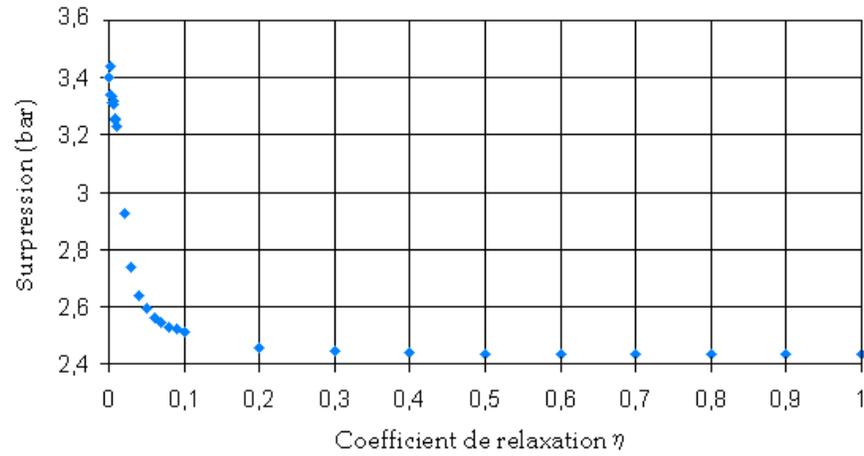


Figure 4.8 : Courbe de la suppression en fonction du paramètre de relaxation η

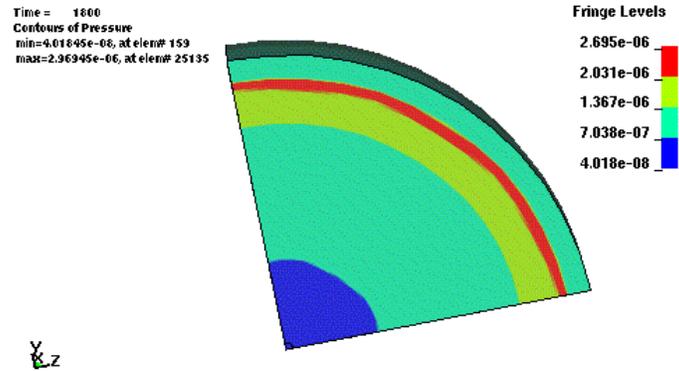


Figure 4.9 : Propagation de la pression à $t=1800\mu\text{s}$ en utilisant la méthode de relaxation retardée des mailles

4.7 Modélisation d'une détonation de l'explosif PBX dans l'air en utilisant la méthode de relaxation retardée des mailles

La figure 4.10 montre l'historique de la pression de l'explosif PBX en utilisant la méthode Lagrangienne, Eulérienne multi-matériaux, et la méthode de relaxation retardée des mailles introduite dans la méthode ALE multi-matériaux avec un coefficient de relaxation égale à $0.001 \text{ } (\mu\text{s}^{-1})$. La pression CJ de l'explosif PBX utilisé est 0.37 Mbar, sa densité est $1.84\text{g}/\text{cm}^3$ et sa vitesse de détonation est $0.88\text{cm}/\mu\text{s}$. Le tableau 4.1 donne les paramètres JWL de cet explosif.

A (Mbar)	B (Mbar)	R_1	R_2	ω
8.5240002	0.1802000	4.5999999	1.3	0.38

Tableau 4.1 : Paramètres JWL de l'explosif PBX

La méthode de relaxation retardée des mailles introduite dans la méthode ALE multi-matériaux donne la valeur de la surpression la plus élevée. Cette valeur est de l'ordre de 4.25 bars. La méthode Lagrangienne donne une surpression de 2.88 bars, et la méthode Eulérienne multi-matériaux donne une surpression de 3.15 bars.

Nous ne possédons pas de résultat expérimental pour ce cas. La courbe de la surpression en fonction du paramètre de relaxation η (*figure 4.11*) montre qu'effectivement que pour $\eta > 0.1 \text{ } (\mu\text{s}^{-1})$, on a un comportement proche d'un comportement Eulérien, et pour $0.001 \text{ } (\mu\text{s}^{-1}) < \eta < 0.1 \text{ } (\mu\text{s}^{-1})$, on a un comportement proche d'un comportement Lagrangien qui permet au maillage de suivre le front de choc.

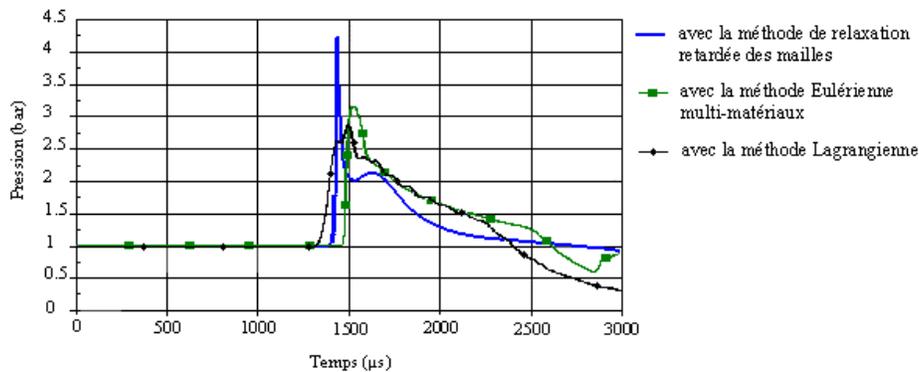


Figure 4.10 : Courbes expérimentale et numérique en utilisant la formulation de relaxation retardée des mailles de l'historique de la pression à 5 pieds de l'explosif

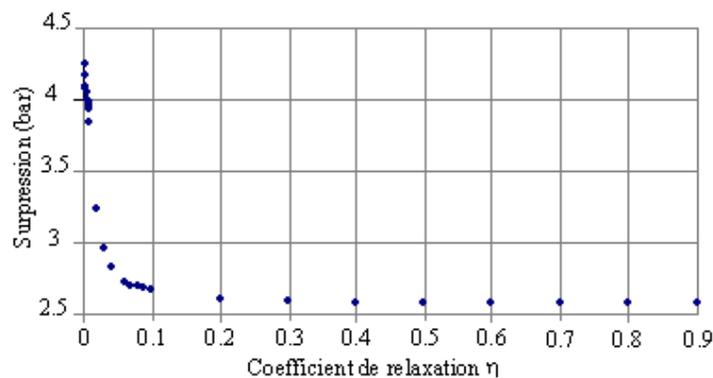


Figure 4.11 : Courbe de la suppression en fonction du paramètre de relaxation η dans le cas de la détonation de l'explosif PBX

4.8 Modélisation d'une détonation avec réflexion d'onde de l'explosif C-4 en utilisant la méthode de relaxation retardée des mailles

La discrétisation de l'explosif C-4 et de l'air a été réalisée par un quart de sphère (grâce aux deux plans de symétrie) composés de 155 602 nœuds et

141 008 éléments de 8-noeuds. Les résultats numériques et expérimentaux sont montrés sur la figure 4.14. Dans le cas numérique, la première surpression est 2.19 bars, et dans le cas expérimental, la surpression est 2.2bars (erreur relative : 0.45%). Les ondes de choc arrivent à la hauteur de 5 pieds à l'instant $t=2\text{ms}$. Le second pic de pression est 1.26 bar dans le cas numérique et 1.2 bar dans le cas expérimental (erreur relative : 5%).

Les figures 4.12 et 4.13 montrent respectivement la propagation de l'onde à $t= 1000\mu\text{s}$ et $t=2000\mu\text{s}$. Ces deux figures montrent que les mailles sont fortement raffinées dans les régions de gradients de grandes pressions. La figure 4.15 présente la surpression en fonction du paramètre de relaxation η . Cette courbe confirme que la valeur du paramètre de relaxation η doit être le plus proche possible de 0 (μs^{-1}) (dans ce cas, une valeur entre 0.001 (μs^{-1}) et 0.01 (μs^{-1}) est raisonnable).

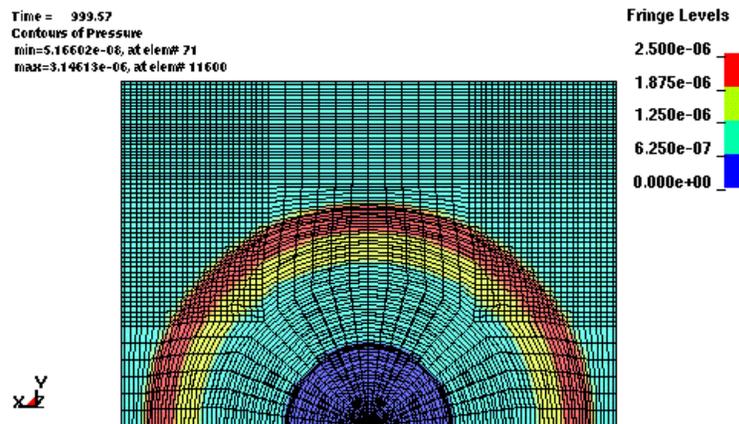


Figure 4.12 : Détonation de l'explosif C-4 dans le cas avec mur à $t=1000\mu\text{s}$ en utilisant la méthode de relaxation retardée des mailles

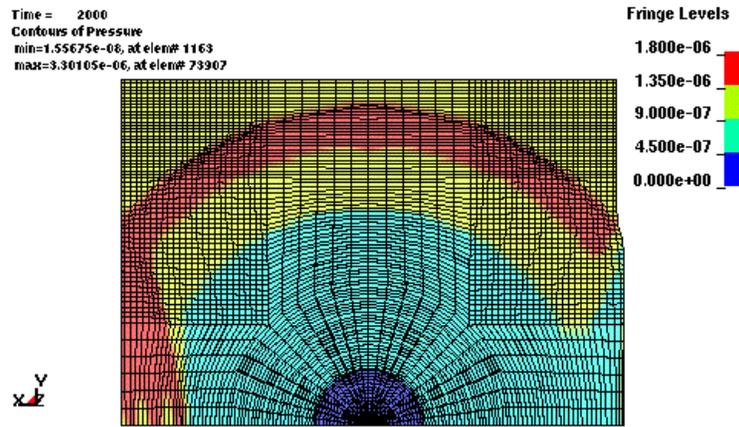


Figure 4.13 : Détonation de l'explosif C-4 dans le cas avec réflexion de l'onde à $t=2000\mu\text{s}$ en utilisant la méthode de relaxation retardée des mailles

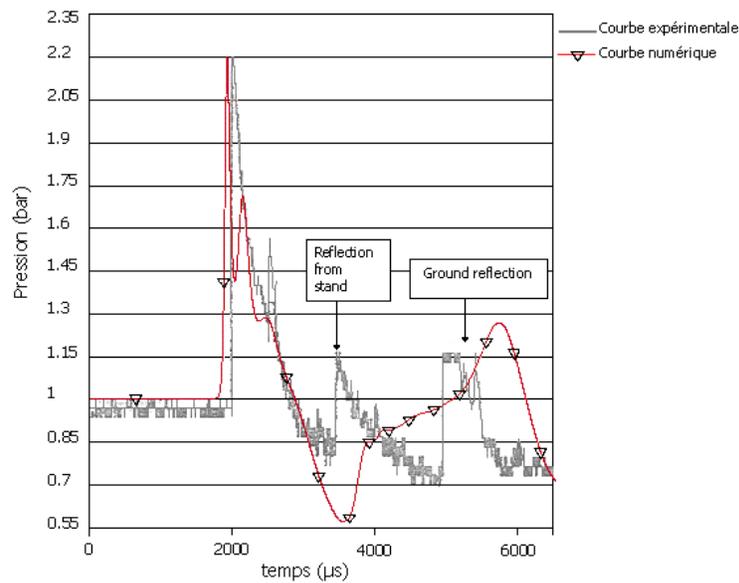


Figure 4.14 : Courbes expérimentale et numérique en utilisant la formulation ALE multi-matériaux de l'historique de la pression à 5 pieds de l'explosif

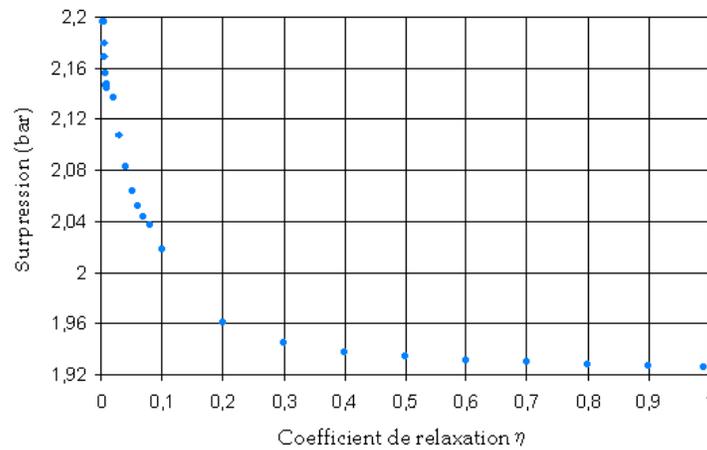


Figure 4.15 : Courbe de la surpression en fonction du paramètre de relaxation η

4.9 Conclusion

Dans ce chapitre la technique ALE multi-matériaux a été appliquée aux deux cas de détonation de l'explosif C-4 dans l'air sans et avec réflexion d'ondes à travers un mur. D'une manière générale, cette méthode permet au maillage de bouger indépendamment du mouvement du matériau, aussi permet-elle d'avoir un maillage régulier. Même si cette méthode résout le problème de grandes distorsions des mailles, elle ne permet pas de raffiner le maillage au front de choc, ce qui diminue la précision de cette méthode pour ce type de problèmes.

D'autre part, la technique de relaxation retardée des mailles a été testée. Cette méthode est un outil efficace pour le traitement des ondes de choc. En utilisant cette technique, le comportement du maillage est proche d'un comportement Lagrangien à proximité du front de choc. Dans les régions loins du choc, le comportement du maillage est proche d'un comportement Eulerien. Cela fournit une grande précision numérique, et réduit les erreurs numériques liées à l'advection. La valeur du paramètre

de relaxation doit être le plus proche possible de 0 (μs^{-1}). La fonction de la relaxation retardée est simple et facile à implémenter dans les codes d'éléments finis existants. En utilisant la méthode de relaxation retardée des mailles, la surpression est très proche de la surpression mesurée expérimentalement, et l'historique de la surpression est quasi confondu avec l'historique du cas expérimental.

Chapitre 5

Etude Numérique d'une détonation forte : Interaction ondes de choc-structure

5.1 Introduction

La pression d'un explosif est limitée par ses propres propriétés. Cette pression est appelée : pression de Chapman-Jouguet. Dans les dernières années, l'utilisation de très grandes pressions est devenue de plus en plus importante dans le domaine industriel. Pour cela, la recherche des méthodes qui génèrent de grandes pressions est très intéressante. Parmi ces méthodes, le phénomène O.D.D. (Overdriven Detonation) est largement utilisé. Ce phénomène peut se produire lors de l'impact d'une plaque métallique à grande vitesse avec un explosif, ou quand un explosif serré à l'extérieur est détoné, ou quand une détonation est convergente [Itoh et al., 2000]. Une investigation expérimentale de ce phénomène a été réalisée par Itoh et al. [Itoh et al., 2002]. Il est obtenu quand une plaque d'aluminium accélérée par un explosif donneur percute un explosif accepteur. La méthode d'ombroscopie a été utilisée pour calculer les vitesses de détonation de l'explosif accepteur. Quand l'explosif accepteur est détoné par la plaque d'aluminium, une grande vitesse de l'onde de détonation se propage dans l'explosif accepteur.

L'objectif de cette étude est de modéliser ce phénomène en utilisant le couplage en pénalité, et de montrer numériquement que les vitesses de détonation de l'explosif accepteur sont plus grandes que les vitesses de Chapman-Jouguet de cet explosif. Puisque les explosifs et l'air subissent de grandes déformations lors de la détonation, la technique utilisée est la formulation Eulérienne multi-matériau pour laquelle le matériau traverse

un maillage fixe dans l'espace et chaque élément peut contenir deux matériaux ou plus. Cette méthode évite complètement les déformations du maillage et elle peut, par un algorithme de couplage Eulérien-Lagrangien, être combinée avec une description Lagrangienne du mouvement pour des parties du modèle qui ne subissent pas d'énormes déformations. Dans notre cas, c'est la plaque d'aluminium qui est modélisée par la méthode Lagrangienne. Les vitesses de détonation pour le cas numérique seront comparées à celles mesurées expérimentalement afin de montrer la capacité du couplage en pénalité de modéliser les problèmes de la détonation forte.

5.2 Interaction ondes de choc-structure

C'est avec l'augmentation de la puissance de calcul des ordinateurs que des algorithmes de couplage entre l'écoulement du fluide et le mouvement de la structure se sont développés depuis les années 70. Dans les dernières années, le couplage fluide-structure a pris une grande importance due aux nouveaux développements dans l'industrie, ce qui a nécessité à développer des algorithmes efficaces et rapides. Cela nécessite le développement des méthodes sur plusieurs niveaux : le bon formalisme pour écrire d'une manière compatible les équations de la structure et du fluide, la description de l'interface entre les deux milieux continus, les algorithmes de couplage entre le fluide et la structure (transmissions des conditions cinématique et des efforts), les techniques de maillage et de «remaillage». Les domaines d'application concernés sont vastes : transports des produits fluides, l'industrie automobile (dynamique de gonflement des airbags, ballonnement de fluide dans les réservoirs, etc.), l'industrie aéronautique (problèmes d'impact d'oiseaux, collision des hélicoptères avec l'eau, etc.), etc.

L'utilisation du couplage Euler-Lagrange est intéressante pour les problèmes d'interaction fluide-structure parce que, premièrement, la formulation Eulérienne multi-matériaux modélise les grandes déformations et deuxièmement, le couplage en pénalité traite les impacts fluide-structure. L'idée de base de cet algorithme est de coupler le mouvement d'un nœud Lagrangien au mouvement du point dans la maille Eulérienne où le nœud Lagrangien est localisé.

Le couplage fluide-structure peut être décrit par les deux pas suivants : Dans le premier pas, les contributions de la force et de la masse des éléments maîtres aux éléments esclaves sont calculées. Deuxièmement, en utilisant les nouvelles forces et masses, les accélérations des nœuds maîtres sont mises à jour. Lorsqu'un nœud Eulérien pénètre dans une structure Lagrangienne, une force de rappel est appliquée sur le nœud qui ne suit pas la condition physique. Cette force le remet sur la surface de la structure. Les forces de pénalité sont calculées proportionnellement à la vitesse de la pénétration. Le majeur problème de l'interaction fluide-structure est : comment transmettre correctement les efforts d'interaction entre le fluide et la structure ?

Plusieurs méthodes de couplage ont été mises en œuvre pour répondre à cette question. La première idée était d'imposer à la frontière du fluide et de la structure une même cinématique. Par exemple, les vitesses des nœuds Lagrangiens composant la frontière de la structure peuvent être déterminées en interpolant les vitesses Eulériennes des nœuds voisins. On peut aussi utiliser l'accélération de la même manière. Cette approche est généralement très dissipative : l'énergie totale du système tend à chuter. Pour assurer la conservation de la quantité de mouvement, le champ des forces d'interaction est évalué, et appliqué en respectant le principe de l'action et de la réaction. La force d'interaction est estimée par la méthode de pénalité qui consiste à permettre une légère pénétration entre les deux maillages. La méthode de pénalité impose une force de rappel sur le nœud esclave (*cf. Figure 5.1*), qui est proportionnelle à la pénétration à travers le segment maître. Cette méthode consiste à disposer à l'interface des ressorts fictifs en tension entre tous les nœuds pénétrant et la surface de contact. La position d'équilibre de ces ressorts correspond à un nœud esclave positionné sur le segment maître.

$$F = -k \cdot d \quad (5.1)$$

où F , d et k sont respectivement la force, la pénétration et une raideur. Cette raideur est donnée par l'équation (5.2) en fonction du module de la

compressibilité K , du volume V et de la face A de l'élément contenant le segment :

$$k = \frac{f K A^2}{V} \quad (5.2)$$

où f est un facteur scalaire, appelé facteur de pénalité, sa valeur par défaut dans LS-DYNA est égale à 0.1. D'une manière générale, l'estimation précise de la valeur de la raideur est difficile, c'est un problème non-linéaire délicat qui dépend de la solution physique recherchée. Théoriquement, quand la raideur est très grande, elle permet de limiter les pénétrations, et le fluide ne traverse pas la structure. Cependant, avec une raideur trop importante, le calcul ne sera pas stable parce que la force de rappel devient relativement trop grande devant les forces physiques. Le couplage en pénalité sera utilisé pour étudier numériquement le problème de la détonation O.D.D., et gérer les interactions entre la formulation Lagrangienne modélisant la plaque d'aluminium et la formulation Eulérienne multi-matériaux modélisant les explosifs et l'air.

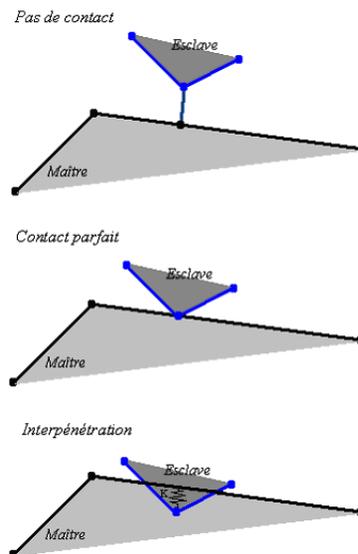


Figure 5.1 : Couplage en pénalité

5.3 Formulation Lagrangienne pour la structure

La formulation Lagrangienne est souvent utilisée en mécanique des structures dont les déformations sont relativement petites pour que les mailles ne subissent pas de grandes distorsions. La conservation de la masse est automatiquement satisfaite car l'une des caractéristiques des contrôles Lagrangiens de volume est de se déformer avec le matériau modélisé de manière à ce que chaque particule matérielle initialement présente dans la maille reste dans cette maille au cours du temps. Les nœuds et les éléments suivent les mouvements du matériau modélisé de manière à ce que les frontières matérielles restent confondues avec les frontières des éléments. Les conditions aux limites sont facilement imposées puisque les frontières du maillage suivent les limites du domaine physique pendant le calcul. Ces avantages font de la méthode Lagrangienne une méthode très appréciée pour le calcul des structures. Cette formulation est classée en deux familles : Une formulation mise à jour et une formulation totale. La première résout le problème de la structure dans la configuration courante : On calcule les inconnues (les champs de déplacements, de vitesses, etc.) à l'instant t à partir de leur valeur à l'instant t_0 . Pour la formulation totale, à chaque instant du calcul, les inconnues sont déterminées à partir de leur valeur initiale.

5.4 Modélisation des fluides

La formulation Eulérienne est utilisée pour modéliser le fluide. Elle est basée sur la méthode split permettant de décomposer le pas de calcul en deux cycles :

- Dans le premier cycle du calcul (cycle Lagrangien), la méthode détermine les champs inconnus du problème. Ce cycle s'apparente à un calcul Lagrangien et le maillage se déforme avec le fluide.
- Dans le deuxième cycle (cycle d'advection), le maillage est remis à sa position initiale. Des calculs sont nécessaires pour retrouver les nouvelles caractéristiques puisque le contenu des mailles a changé.

5.5 Etude expérimentale de la détonation forte

Le dispositif d'expérience est montré sur la figure (5.2). Il se compose d'un détonateur électrique pour détoner les explosifs, un explosif donneur, une plaque d'aluminium, un explosif accepteur, et une fibre optique pour mesurer la vitesse de détonation [Itoh et al., 2002]. Le tube extérieur a un diamètre intérieur de 36 mm et un diamètre extérieur de 45 mm. Il a été rempli d'explosifs. Deux types d'explosifs (SEP et PBX) ont été utilisés dans cette étude. L'explosif SEP utilisé est fabriqué de 65 % du PETN et 35% du Paraffine. Il a une vitesse de détonation de 6970 m/s et une pression CJ de 15.9GPa. L'explosif PBX utilisé est fabriqué de 85% du HMX. Il a une vitesse de détonation de l'ordre de 7842.8m/s, et une pression CJ de 25.24GPa. 7g de l'explosif SEP a été utilisé comme explosif propagé pour détoner l'explosif PBX puisque celui ci ne détone pas par le détonateur électrique. L'explosif donneur utilisé pour accélérer la plaque d'aluminium est l'explosif PBX, et l'explosif accepteur utilisé pour produire le phénomène O.D.D. est aussi l'explosif PBX. Quatre cas ont été étudiés selon la longueur de l'explosif donneur, a, et la longueur de l'explosif accepteur, b. Une plaque d'aluminium de 1mm ou 0.5mm d'épaisseurs (selon le cas étudié) a été utilisée. Le capteur ionique a été placé sous le détonateur électrique pour être utilisé comme déclencheur de la caméra.

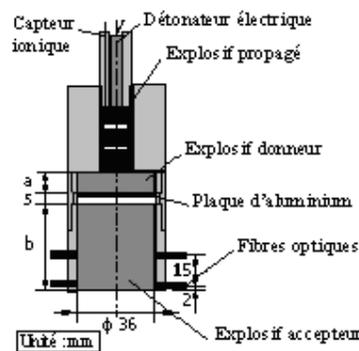


Figure 5.2 : Dispositif de l'expérience

La méthode de la fibre optique est une méthode convenable pour des mesures des vitesses de détonation. Le principe de cette méthode est montré sur la figure (5.3). Un câble à fibres optiques avec un diamètre de 2mm a été placé dans l'explosif accepteur à des intervalles de 15mm. Quand l'onde de l'explosif accepteur progresse, et la lumière entre dans un câble à fibres optiques, un signal de sortie sous forme d'une ligne rouge apparaît sur l'oscilloscope. Le temps durant lequel la lumière va de la première fibre optique jusqu'à la suivante fibre a été mesuré, et la vitesse moyenne de détonation a été calculée : $D = \Delta d / \Delta t$. Les résultats des mesures sont montrés dans le tableau (5.1). La figure (5.2) montre La position des longueurs a et b.

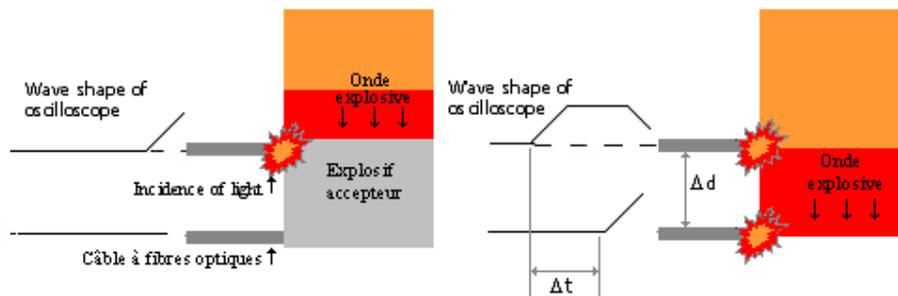


Figure 5.3 : Méthode optique

Cas expérimental	Vitesse de détonation
1. a=5mm b=45mm Epaisseur de la plaque 0.5mm	9118m/s
2. a=10mm b=40mm Epaisseur de la plaque 1mm	9363m/s
3. a=10mm b=30mm Epaisseur de la plaque 1mm	9740m/s
4. a=10mm b=20mm Epaisseur de la plaque 0.5mm	10000m/s

Tableau 5.1 : Résultats expérimentaux des vitesses de détonation

5.6. Etude numérique du phénomène de la détonation forte

Pour modéliser la détonation du PBX utilisé, l'équation d'état JWL (équation 2.24) a été utilisée afin de calculer la pression des produits explosifs. Les paramètres JWL de l'explosif PBX utilisé sont montrés dans le tableau 4.1. Le point d'amorce est placé au centre du cylindre ($x=0, y=0, z=0$). La discrétisation des explosifs donneur et accepteur, et de l'air est réalisée par un quart de maillage grâce aux deux plans de symétrie ($x=0$ et $y=0$). La figure 5.4 montre le modèle utilisé.

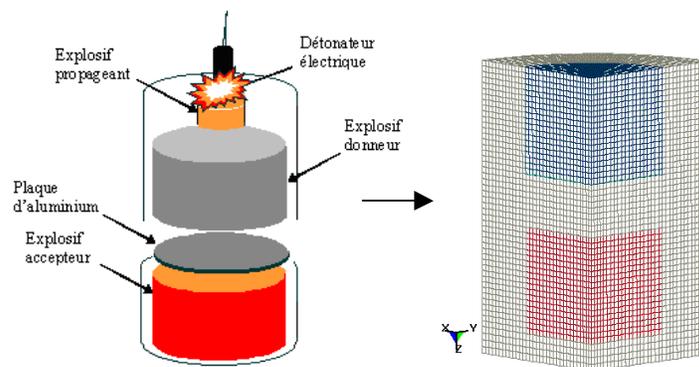


Figure 5.4 : Modélisation du phénomène de la détonation forte

- Cas 1 : $a=5\text{mm}$, $b=45\text{mm}$, épaisseur de la plaque 0.5mm .

Dans ce cas, la longueur de l'explosif donneur est 5mm , la longueur de l'explosif accepteur est 45mm , le diamètre des explosifs est 36mm et l'épaisseur de la plaque est 0.5mm . 109480 éléments solides à 8 nœuds, 132534 nœuds, et 469 éléments (pour la plaque) ont été utilisés dans ce modèle (cf. Figure 5.5). Les éléments utilisés pour modéliser la plaque sont des éléments Belytschko-Lin-Tsay à quatre nœuds. La pression provenant de l'explosif donneur permet à la plaque métallique d'avancer avec une

grande vitesse vers l'explosif accepteur, qui se détone à son impact avec la plaque. La figure 5.6 montre la déformation de la plaque métallique à $t=5\mu\text{s}$.

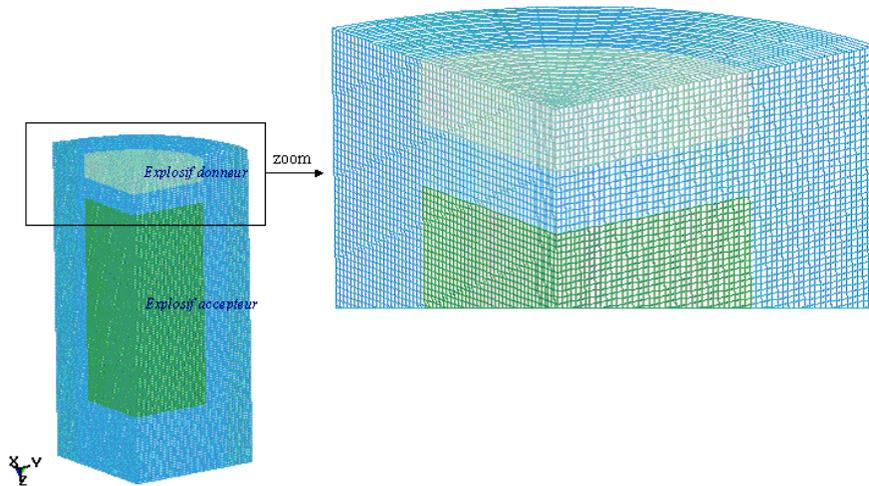


Figure 5.5 : Modèle d'éléments finis du cas 1

Les Figures 5.7 et 5.8 montrent la propagation de la pression dans les explosifs donneur et accepteur. L'historique de la pression de deux éléments distants de 15mm est présenté sur la figure 5.9. Les deux courbes présentent une surpression, due à l'arrivée de l'onde de choc. La différence entre les temps d'arrivée de l'onde aux deux éléments considérés, est calculée. Le rapport de la distance (15mm) sur le temps donne la vitesse de détonation :

$$t_1 = 6.8228\mu\text{s}, t_2 = 8.4479\mu\text{s}.$$

$$V_d = D / (t_2 - t_1) = 9230.20 \text{ m/s}$$

t_1 et t_2 sont les temps d'arrivées consécutifs qui correspondent expérimentalement aux endroits du câble à fibres optique, et D est la distance de deux éléments considérés ($D=15\text{mm}$).

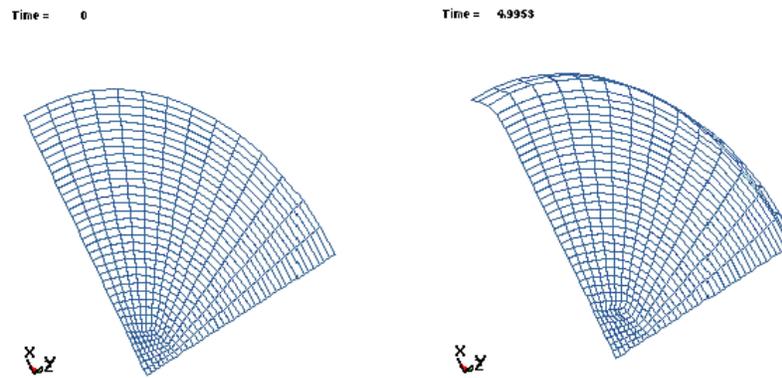


Figure 5.6 : Plaque métallique à $t=0\mu\text{s}$ et $t=5\mu\text{s}$ pour le cas 1

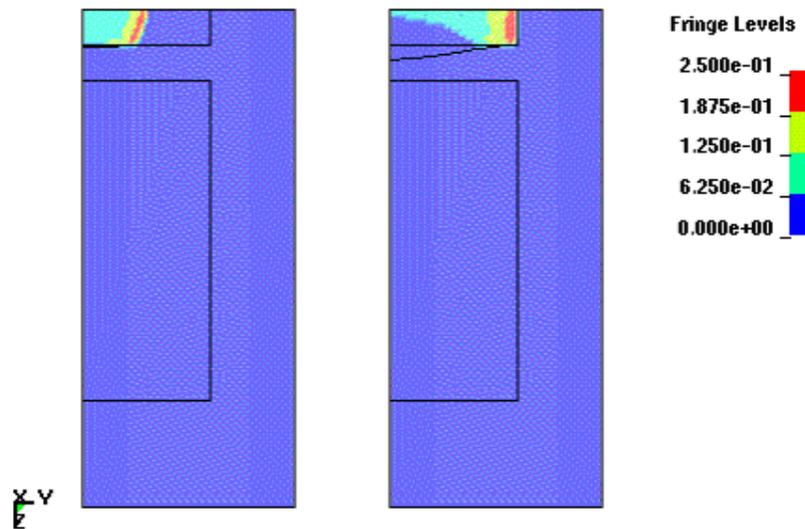


Figure 5.7 : Propagation de la pression dans l'explosif donneur à $t=1\mu\text{s}$ et $t=2\mu\text{s}$ pour le cas 1

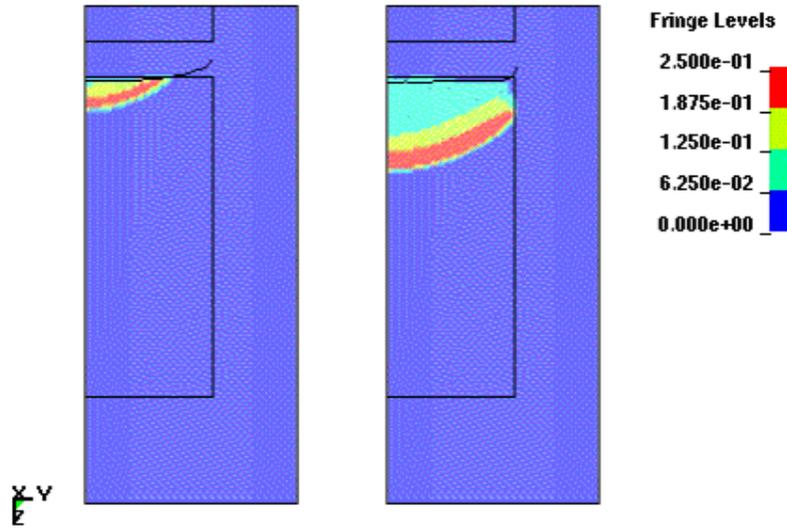


Figure 5.8 : Propagation de la pression dans l'explosif accepteur à $t=4\mu\text{s}$ et $t=5\mu\text{s}$ pour le cas 1

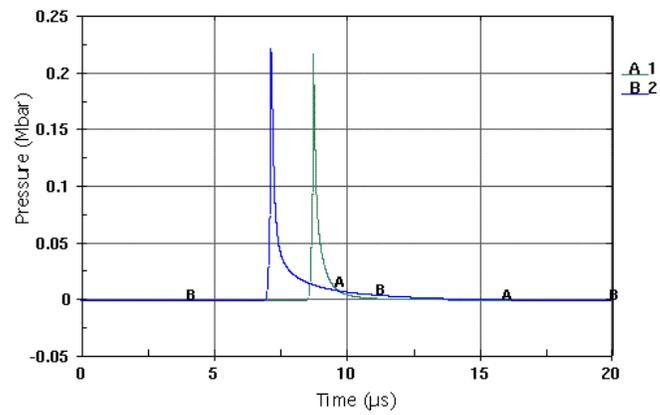


Figure 5.9 : Historique de la pression de deux éléments distants de 15mm pour le cas 1

- Cas 2 : a=10mm, b=40mm, épaisseur de la plaque 1mm.

109480 éléments solides à 8-nœuds, 132534 nœuds et 469 éléments (pour la plaque) ont été utilisés pour modéliser ce cas (cf. figure 5.10). Les figures 5.12 et 5.13 montrent la propagation de la pression à $t=1\mu\text{s}$, $2\mu\text{s}$, $5\mu\text{s}$ et $6\mu\text{s}$. La figure 5.14 montre l'historique de deux éléments distants de 15mm pour calculer numériquement la vitesse de détonation.

$$t_1 = 7.1439\mu\text{s}, t_2 = 8.7419\mu\text{s}$$

$$V_d = D / (t_2 - t_1) = 9386.73 \text{ m/s}$$

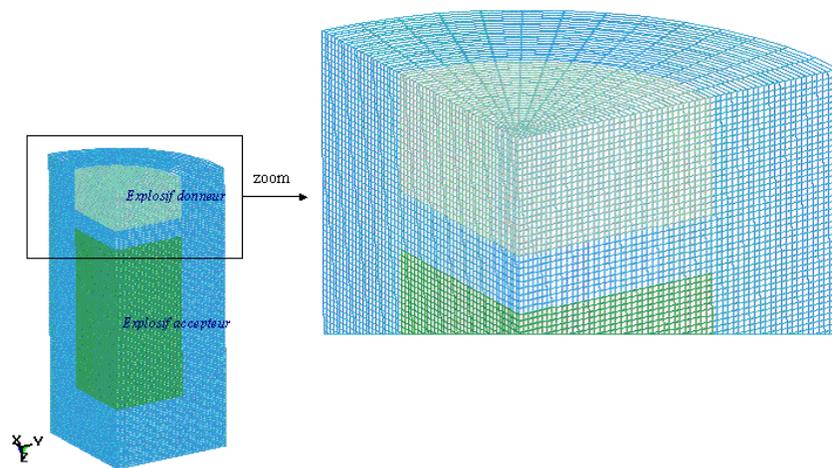


Figure 5.10 : Modèle d'éléments finis du cas 2

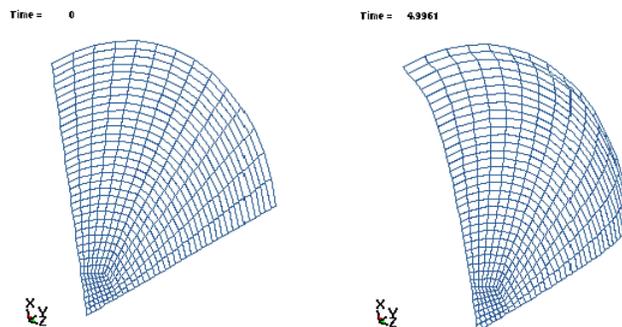


Figure 5.11 : Plaque métallique à $t=0\mu\text{s}$ et $t=5\mu\text{s}$ dans le cas 2

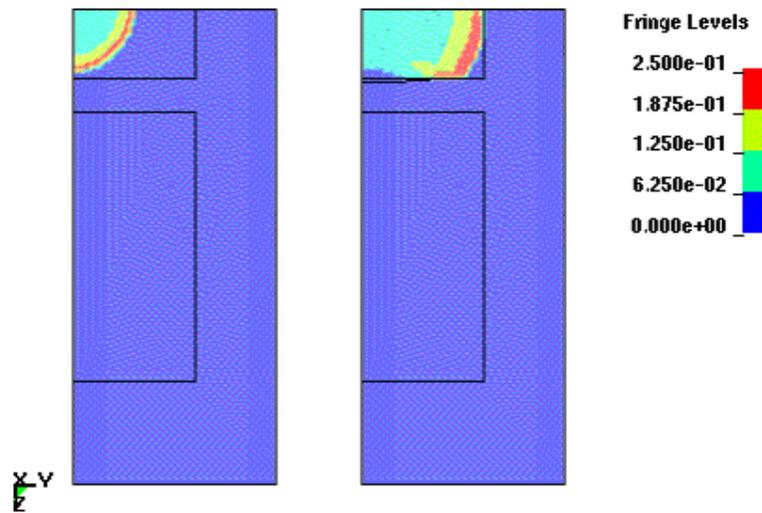


Figure 5.12 : Propagation de la pression dans l'explosif donneur à $t=1\mu\text{s}$ et $t=2\mu\text{s}$ pour le cas 2

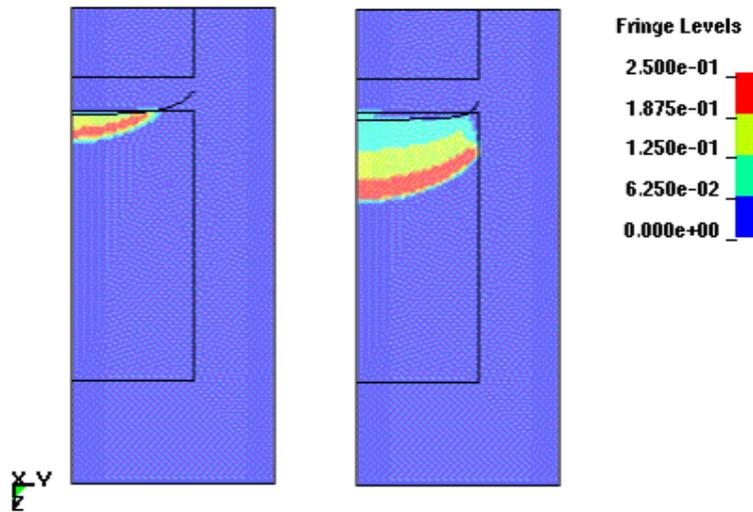


Figure 5.13 : Propagation de la pression dans l'explosif accepteur à $t=5\mu\text{s}$ et $t=6\mu\text{s}$ pour le cas 2

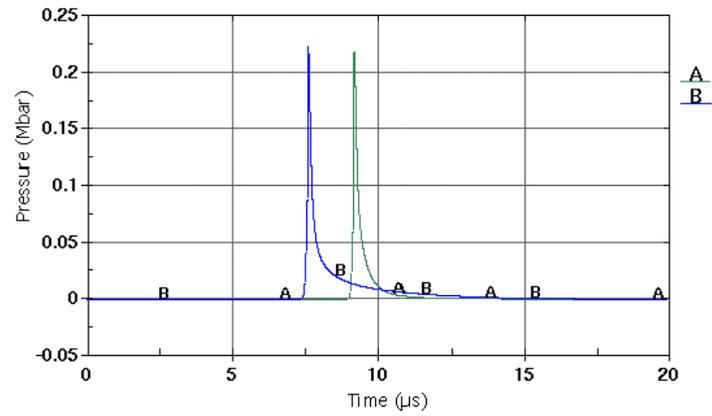


Figure 5.14 : Historique de la pression de deux éléments distants de 15 mm pour le cas 2

- Cas 3 : $a=10\text{mm}$, $b=30\text{mm}$, épaisseur de la plaque 1mm.

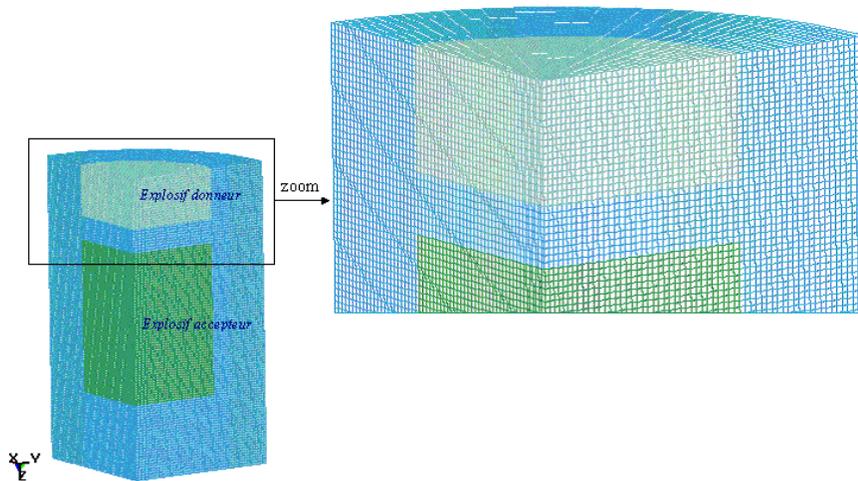


Figure 5.15 : Modèle d'éléments finis du cas 3

93380 éléments solides à 8-nœuds, 113673 nœuds et 469 éléments ont été utilisés pour modéliser ce cas (cf. figure 5.15). Les figures 5.17 et 5.18 montrent respectivement la propagation de la pression dans les explosifs donneur et accepteur. La figure 5.19 montre l'historique de deux éléments distants de 15mm.

$t_1 = 6.2678\mu\text{s}$, $t_2 = 7.8247\mu\text{s}$, $V_d = D / (t_2 - t_1) = 9634.53 \text{ m/s}$

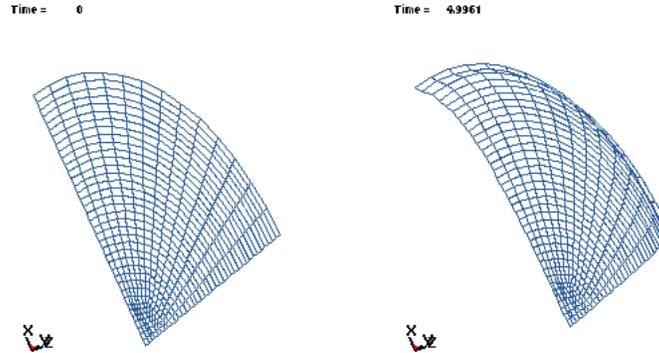


Figure 5.16 : Plaque métallique à $t=0\mu\text{s}$ et $t=5\mu\text{s}$ pour le cas 3

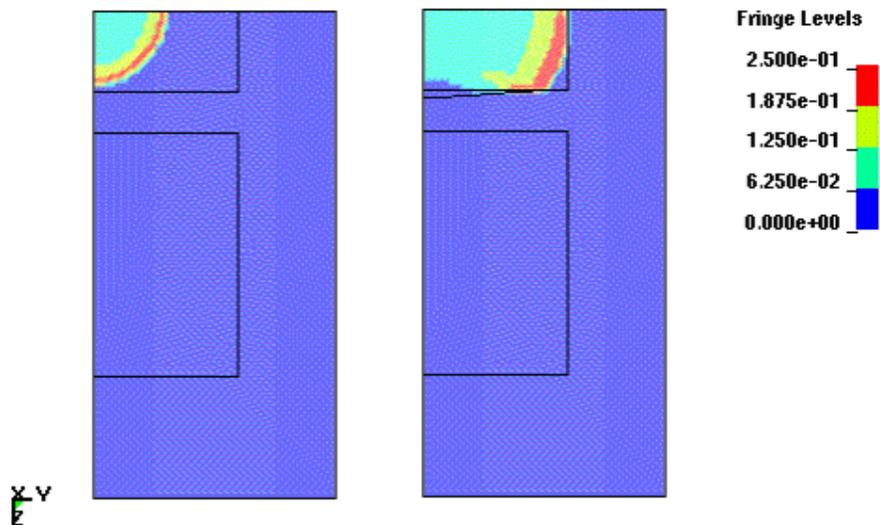


Figure 5.17 : Propagation de la pression dans l'explosif donneur à $t=1\mu\text{s}$ et $t=2\mu\text{s}$ pour le cas 3

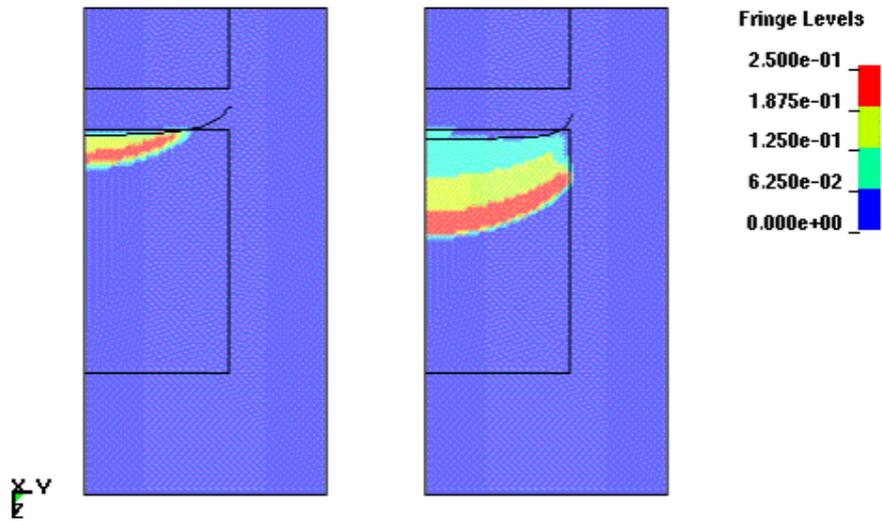


Figure 5.18 : Propagation de la pression dans l'explosif accepteur à $t=5\mu\text{s}$ et $t=6\mu\text{s}$ pour le cas 3

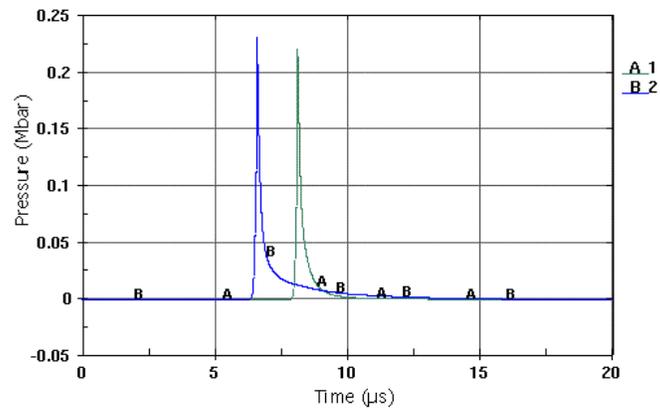


Figure 5.19 : Historique de la pression de deux éléments distants de 15mm pour le cas 3

- Cas 4 : $a=10\text{mm}$, $b=20\text{mm}$, épaisseur de la plaque 0.5mm .

Dans ce cas, nous avons utilisé 77280 éléments solides à 8-nœuds, 94814 nœuds et 469 éléments (pour la plaque) (cf. figure 5.20). Les figures 5.22 et 5.23 montrent la propagation de la pression dans les explosifs donneur et accepteur. La figure 5.24 donne l'historique de deux éléments distants de 15mm . $t_1 = 4.3095\mu\text{s}$, $t_2 = 5.8189\mu\text{s}$, $V_d = 9937.72\text{ m/s}$

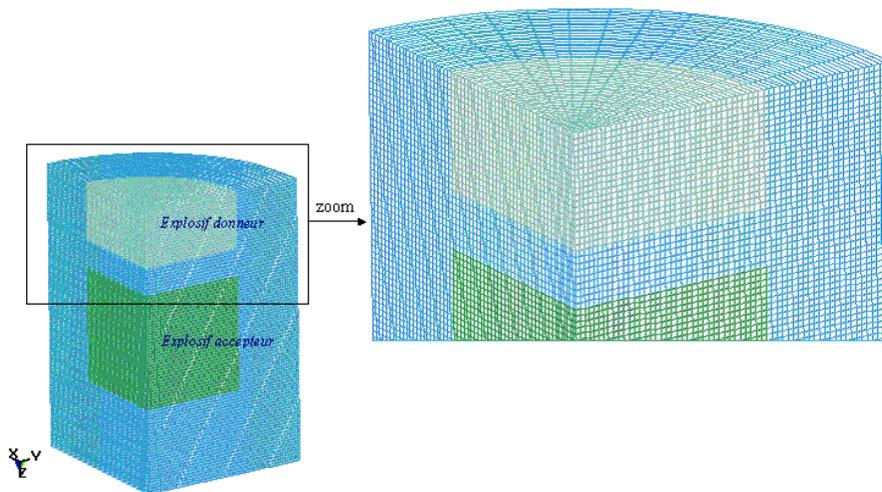


Figure 5.20 : Modèle d'éléments finis du cas 4

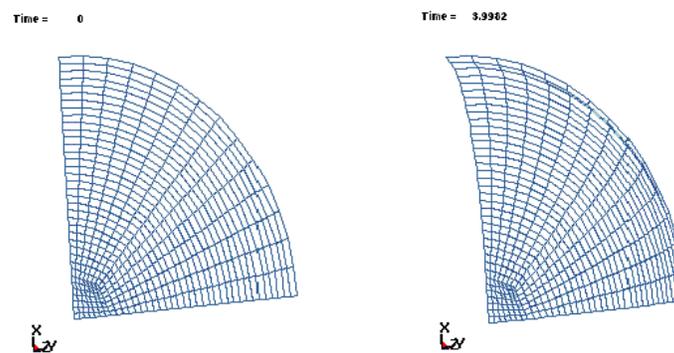


Figure 5.21 : Plaque métallique à $t=0\mu\text{s}$ et $t=4\mu\text{s}$ pour le cas 4

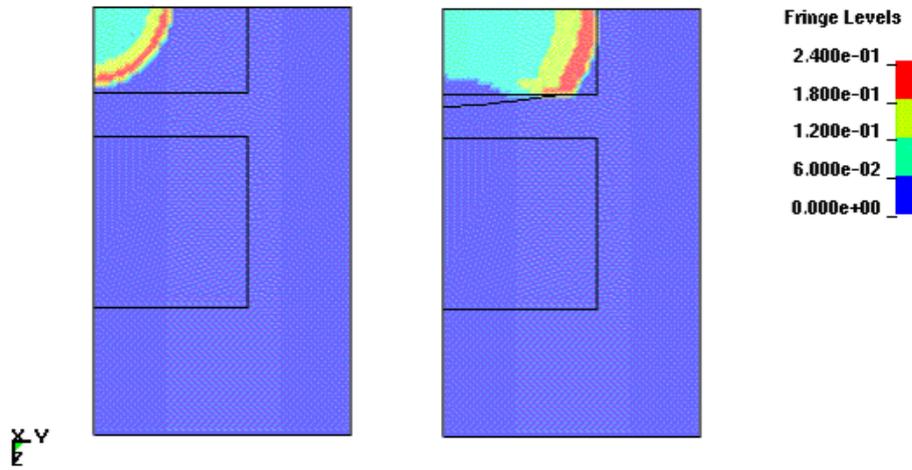


Figure 5.22 : Propagation de la pression dans l'explosif donneur à $t=1\mu\text{s}$ et $t=2\mu\text{s}$ pour le cas 4

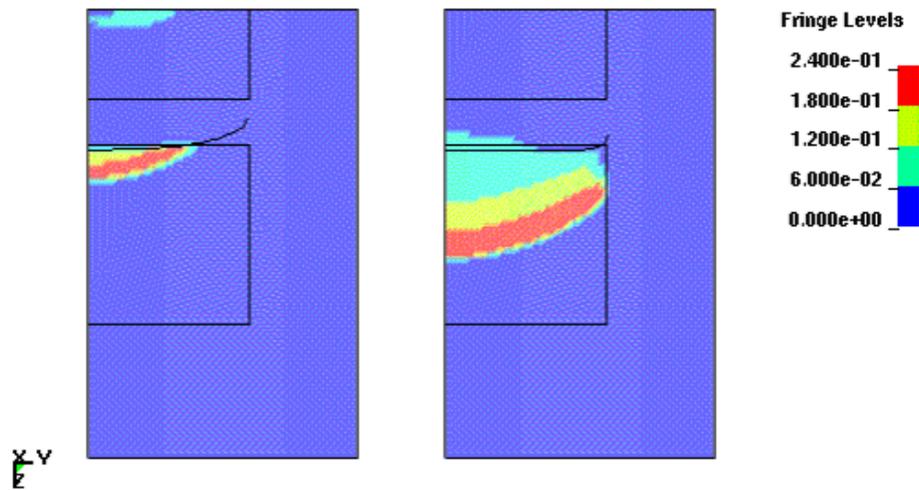


Figure 5.23 : Propagation de la pression dans l'explosif accepteur à $t=4\mu\text{s}$ et $t=5\mu\text{s}$ pour le cas 4

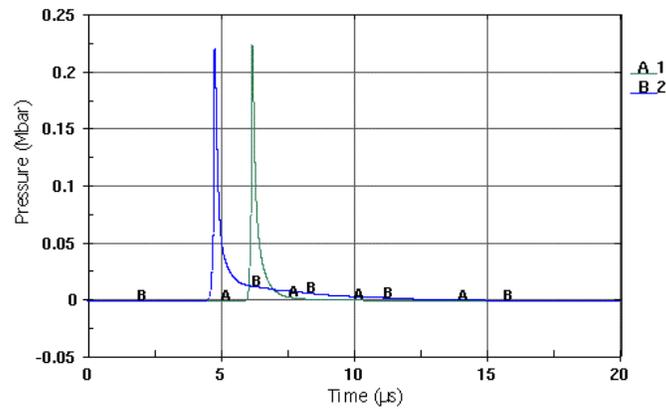


Figure 5.24 : Historique de la pression de deux éléments distants de 15mm pour le cas 4

Cas	Vitesse de détonation (m/s) Résultats expérimentaux	Vitesse de détonation (m/s) Résultats numériques	Erreur relative
1	9118	9230.20	1.23%
2	9363	9386.73	0.25%
3	9740	9634.53	1.08%
4	10000	9937.72	0.62%

Tableau 5.2 : Tableau récapitulatif des résultats numériques et expérimentaux du phénomène O.D.D

5.7 Conclusion

Dans cette étude, le phénomène O.D.D. est simulé en utilisant l'algorithme de couplage en pénalité. Les comparaisons des vitesses de détonation pour plusieurs cas aux vitesses mesurées expérimentalement montrent une bonne corrélation. Dans les quatre cas étudiés, l'erreur relative maximale est inférieure à 1.25%.

Chapitre 6

Conclusion

Cette thèse est consacrée à la modélisation des phénomènes de détonations en utilisant le code de calculs par éléments finis LS-DYNA. L'étude de l'effet des détonations est importante pour la sécurité (transports, bâtiments, etc.). De même, plusieurs domaines industriels utilisent de plus en plus des systèmes explosifs [Fujiwara et al., 2003], [Iyama et al., 2004], etc. Les expériences fournissent de vrais résultats, cependant elles sont souvent coûteuses, consommatrices de temps, et peuvent être difficiles à réaliser. Les solutions numériques si elles sont suffisamment précises peuvent remplacer ces expériences. Nous avons modélisé différents problèmes de détonations, et comparé les résultats numériques obtenus aux résultats expérimentaux afin de montrer la capacité de modéliser de tels phénomènes, et de connaître la meilleure méthode pour chacun des problèmes étudiés.

Dans le second chapitre, nous avons présenté la théorie de Chapman-Jouguet. Des points essentiels ont été développés : comment le point Chapman- Jouguet et la courbe d'Hugoniot sont-ils déterminés ? De même, les conditions de saut de Rankine-Hugoniot qui relient les propriétés des matériaux d'un côté du choc à celles de l'autre côté ont été développées. L'équation d'état Jones-Wilkins-Lee (JWL) a été détaillée, en présentant comment les paramètres de l'équation d'état JWL sont-ils déterminés ? Ensuite, un rappel des méthodes et des hydrocodes employés pour les problèmes de propagation d'ondes de choc a été présenté. Enfin, la méthode de viscosité artificielle, qui permet de remédier aux oscillations numériques dû au calcul de choc, a été présentée.

Dans le chapitre 3, la méthode présentée est la méthode Eulérienne multi-matériaux. C'est une méthode, où les mailles restent fixes, et où chaque maille peut contenir deux ou plusieurs matériaux. Nous avons appliqué cette méthode à plusieurs cas de détonations :

- Dans le premier cas, nous avons modélisé la détonation de l'explosif C-4 dans l'air. En comparant l'historique de la pression à 5 pieds de l'explosif aux résultats expérimentaux, une grande corrélation entre les deux courbes a été obtenue. La surpression obtenue numériquement était de 3 bars, celle de l'expérience était de 3.40 bars.

- Dans le second cas, un mur de blocage est placé à 4 pieds du centre de l'explosif C-4 conduisant ainsi à une réflexion d'ondes de choc. Le résultat expérimental de l'historique de la pression à 5 pieds de l'explosif montre la présence de deux pics de pression. Le premier correspond à la propagation directe du front de choc, le second est lié à la réflexion d'ondes de choc sur le mur. Expérimentalement, la valeur du premier pic de la pression est 2.20bars. Numériquement, nous avons obtenu une surpression égale à 2.19bars. Le temps d'arrivée du choc à la hauteur de 5 pieds est 2ms (numériquement et expérimentalement). Le second pic de la pression est 1.19bar dans le cas expérimental, et 1.26 bar dans le cas numérique.

- Le troisième cas est consacré à l'explosion du cordeau détonant en forme de droite, cercle, et spirale. Cette étude nous a permis de montrer numériquement que l'utilisation des formes spirales permet la convergence de la pression, et donne à l'explosif une pression plus élevée que la pression de Chapman-Jouguet. Les résultats des historiques de la pression à 50mm de l'explosif montrent une très bonne corrélation entre l'étude numérique et l'étude expérimentale. Les erreurs relatives pour les quatre cas liés au cordeau détonant sont inférieures à 2.5%.

Dans le quatrième chapitre, la méthode utilisée est la méthode ALE multi-matériaux. Les mailles ont un mouvement libre et indépendant de la dynamique du matériau évitant ainsi plusieurs inconvénients liés aux méthodes Lagrangienne et Eulérienne. Pour des problèmes de détonations,

cette méthode a quelques inconvénients puisqu'elle ne permet pas d'avoir des mailles fines près de l'onde de choc, ce qui diminue la précision des résultats. La nouvelle méthode de relaxation retardée des mailles introduite dans la méthode ALE multi-matériaux a été testée.

Cette méthode adaptative qui permet de raffiner les mailles à proximité du front de choc nous a permis d'avoir une précision nettement meilleure. L'application de cette méthode à la détonation sans et avec mur de l'explosif C-4 dans l'air nous a permis, en se référant aux résultats expérimentaux, de comprendre la manière avec laquelle le paramètre de relaxation η influence la valeur de la surpression, et de savoir que ce paramètre devrait être le plus proche possible de la valeur 0 (μs^{-1}). Cette méthode nous a donné les meilleurs résultats pour les deux cas de détonations du C-4 dans l'air (sans et avec mur). La surpression obtenue numériquement pour le cas sans mur est de l'ordre de 3.40 bars. C'est la même valeur mesurée expérimentalement. De même, il y a une très bonne corrélation entre l'historique de la pression pour les deux cas (numérique et expérimental). Pour le cas avec mur, le premier pic de pression est 2.19 bars (2.20 bars dans le cas expérimental). Le second pic de pression est 1.26 bar (1.20 bar dans le cas expérimental).

Dans le cinquième chapitre, la modélisation du phénomène de la détonation forte (Overdriven detonation) a été réalisée. Ce phénomène, qui consiste à détoner un explosif qui pousse, avec une grande vitesse, une plaque métallique qui percute un second explosif, permet de donner au second explosif une vitesse de détonation supérieure à la vitesse de Chapman-Jouguet. La modélisation de ce problème d'interaction ondes de choc-structure a été réalisée par le couplage en pénalité. Les valeurs des vitesses de détonation pour le second explosif ont été calculées numériquement, et comparées aux valeurs obtenues expérimentalement. Pour les quatre cas étudiés, l'erreur relative est inférieure à 1.25%, ce qui montre la capacité du couplage en pénalité à modéliser de tels phénomènes.

On peut conclure que la méthode Lagrangienne n'est pas adaptée aux problèmes de détonation puisque le maillage suit les mouvements des matériaux qui subissent de grandes déformations. L'application de cette méthode au cas de la détonation du C-4 dans l'air (sans mur) nous a montré que l'erreur relative est de l'ordre de 25%. La méthode Eulérienne multi-matériaux est une méthode stable qui nous a donné des résultats très satisfaisants pour la détonation du cordeau détonant (en forme droite, spirale et circulaire) dans l'eau, et pour la détonation de l'explosif C-4 dans l'air (pour les cas sans et avec mur). La méthode de relaxation retardée des mailles introduite dans la méthode ALE multi-matériaux est la plus adaptée pour les cas de détonation de l'explosif C-4 dans l'air (sans et avec mur). Le maillage est fin dans les régions de grandes pressions, et ce raffinement de maillage suit le front de choc.

Bibliographie

- Addressio, F.L., Carroll, D.E., Dukowicz, J.K., Harlow, F.H., Johnson, J.N., Kashiwa, B.A., Maltrud, M.E., and Ruppel, H.M., CAVEAT: A Computer Code for Fluid Dynamics Problems with Large Distortion and Internal Slip, LANL Report, LA-10613-MS, Rev. 1, 1992.
- Amsden, A.A. and Hirt, C.W., YAQUI : An Arbitrary Lagrangian-Eulerian Computer Program for Fluid Flow at All Speeds, Los Alamos Scientific Laboratory, Report LA-5100, 1973.
- Amsden, A.A., Ruppel, H.M., and Hirt, C.W., SALE : A Simplified ALE Computer Program for Fluid Flow at All Speeds, Los Alamos National Laboratory, Report LA-8095, 1980 .
- Amsden, A.A. and Ruppel, H.M., SALE-3D : A Simplified ALE Computer Program for Calculating Three-Dimensional Fluid Flow, NUREG/CR-2185 LA-8905, 1981 .
- Andelfinger, U., Simulations of Underwater Explosions Against Submerged Structures Using the DYSMAS/ELC Code - Part A, Proceedings of the 65th Shock and Vibration Symposium II, 243, 1994.
- Anderson, S., Dube, E., Otero I., and Sharp R., Users Manual for ALE3D - An Arbitrary Lagrange/Eulerian 3D Code System", Lawrence Livermore National Laboratory, 1993.
- Asanuma, T., Handbooks on the Visualization of Flows, Asakura Publishing House, Tokyo, Japan, 1977.
- Ashley, S., Safety in the sky: Designing bomb-resistant baggage containers, Mechanical Engineering, pp. 81-84, 1992.
- Attaway, S.W., Update of PRONTO 2D and PRONTO 3D Transient Solid Dynamics Program, Sandia National Laboratories, Report SAND90-0102, 1990.
- Baum, J.D., Luo, H., and Löhner, R., Numerical simulation of a blast inside a Boeing 747, AIAA Paper 93-3091, 1993.

- Bharatram, G., In Moon, Y., Venkayya, V.B., and Schimmels, S.A., Local panel model analysis of Boeing-707, Flight Dynamics Directorate, Wright Laboratory, Air Force Materiel Command, Wright-Patterson, AFB, OH, 1995.
- Belytschko, T. , Flanagan, D. F., and Kennedy, J.M., Finite element methods with user-controlled meshes for fluid-structure interaction, *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.* 33, 669-688, 1982.
- Belytschko, T., Lee, S.-H., Yeh, I-S., Lin, J.I, Tsay, C.-S., Kennedy J.M., Adaptivity in Crashworthiness Calculations, *Shock and Vibration*, N°2, pp. 97-106, 1993.
- Benson, D.J., An efficient, Accurate, Simple ALE Method for Nonlinear Finite Element Programs, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol.72, pp. 305-350, 1989.
- Benson, D.J., Shock Capturing Methods in Hydrocodes, *Computational Aspects of Contact, Impact and Penetration*, Elmepress International, 1991.
- Benson, D.J., Computational methods in Lagrangian and Eulerian hydrocodes, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 99, 235-394, 1992.
- Benson, D.J., Momentum Advection on a Staggered Mesh, *Journal of Computational Physics*, Vol.100, No.1, pp.143-162, 1992r.
- Bergmann, V.L., Transient Dynamic Analysis of Plates and Shells With PRONTO 3D, Sandia National Laboratories report SAND91-1182, 1991.
- Brooks, A.N., Hughes, T.J.R., Streamline upwind Petrov-Galerkin formulations for convection dominated flows with particular emphasis on the incompressible Navier-Stokes equations, *Comput. Methods in Appl. Mech. Engrg.* 32, 199-259, 1982.
- Century Dynamics, AUTODYN User's Manual Version 2.1, Century Dynamics Inc., Oakland, CA, 1989.
- Chen, V.L., First successful simulation of on-board explosion will aid in aircraft hardening studies, *Simulation* 68:2, pp. 107-110, 1997.
- Chisum, J.E., Shin, Y.S., Multimaterial Eulerian and Coupled Lagrangian-Eulerian Finite Element Analysis of Underwater Shock Problems, Naval Postgraduate School report NPSME- 95-001, 1995.

- Choi, Y.W., Structure-occupant integrated analysis of an automobile equipped with an airbag, Cray Channels 16,2, 212-26, 1994.
- Chorin, A., Hughes, T.J.R., McCracken, M.F., and Marsden, J.E., Product Formulas and Numerical Algorithms, Commun. Pure Appl. Math. Vol.31, pp. 205-256, 1978.
- Couch, R., Albright, E., and Alexander, N., The JOY Computer Code, Lawrence Livermore National Laboratory, UCID-19688, 1983.
- Crawford, D., CTH Reference Manual: Explicit Heat Conduction, Sandia National Laboratories report SAND95-2623, 1995.
- Davis, W.C., High Explosives The Interaction of chemistry and mechanics, in Los Almos Science, Vol.2, No.1, 1981.
- DeBar, R.B., Fundamentals of the KRAKEN Code, Lawrence Livermore National Laboratory, Technical Report UCIR-760, 1974.
- Demuth, R.B., Margolin, L.G., Nichols, B.D., Adams, T.F., and Smith, B.W., SHALE, A Computer Program for Solid Dynamics, Los Almos National Laboratory, Report LA-10236, 1985.
- Dobratz, B.M., LLNL Explosives Handbook, Properties of Chemical Explosives and Explosive Simulants, Lawrence Livermore National Laboratory, Report DE85-015961, 1981.
- Donea, J., Arbitrary Lagrangian-Eulerian finite element methods, Comput. Methods for Transient Analysis, 474-516, 1983.
- Du Bois, P., Past, present and future of industrial crashworthiness analysis, Cray Channels 12,1, pp. 2-5, 1990.
- Farnsworth, A.V.Jr., CTH Reference Manual: Cell Thermodynamics Modifications and Enhancements, Sandia National Laboratories report SAND95-2394, 1995.
- Fickett, W., Davis W.C., Detonation, University of California Press, Berkeley, 1979.
- Frank, T., Gruber, K., Numerical simulation of frontal impact and frontal offset collisions, Cray Channels 13,4, 2-6, 1991
- Fujiwara, K., Hiroe, T., Asaoka, M., Shock sterilization of dry powder foods, Journal of Pressure Vessel Technology, Trans. ASME, Vol. 460, pp 271-276, 2003.

- Glimm, J., Solutions in the large for nonlinear hyperbolic systems of equations, *Comm. Pure Appl. Math.*, vol. 18, p. 697 - 715, 1965
- Godunov, S.K., A Finite difference method for the numerical computation of discontinuous solutions of the equations of fluid dynamics, *Mat. Sb.* 47, 271-306, 1959.
- Groenenboom, P. ed., *MSC/PISCES User's Manual*, Version 30, The MacNeal-Schwendler Corporation, Los Angeles, CA, 1991.
- Hageman, L.J., Wilkins, D.E., Sedgwick, R.T., and Wadell, J.L., *HELP A Multi-material Eulerian Program for Compressible Fluid and Elastic-Plastic Flows in Two Space Dimensions and Time*, System, Science and Software, SSS-R-75-2654, 1975.
- Hallquist, J.O., *User's Manual for DYNA2D - An Explicit Two-Dimensional Hydrodynamic Finite Element Code with Interactive Rezoning*, UCID-18756, Rev.2, Lawrence Livermore National Laboratory, 1984.
- Hallquist, J.O., Benson D. J., *User's Manual for DYNA3D: Nonlinear Dynamic Analysis of Structures*, Rev.3, UCID-19592, Lawrence Livermore National Laboratory, Livermore, CA, 1987.
- Hallquist, J.O., *User's Manual For DYNA2D -- An Explicit Two-Dimensional Hydrodynamic Finite Element Code with Interactive Rezoning and Graphical Display*, report UCID-18756, Rev. 3, Lawrence Livermore National Laboratory, 1988.
- Hallquist, J.O., *LS-DYNA3D Theoretical Manual*, Livermore Software Technology Corporation report 1018, 1991.
- Hallquist, J.O. and Stillman D.W., *VEC/DYNA3D User's Manual*, Livermore Software Technology Corporation report 1018, 1991.
- Hallquist, J.O., *LS-DYNA User's Manual Version 940*, Livermore Software Technology Corporation, California, 1997.
- Hallquist, J.O., *LS-DYNA, Theoretical Manual*, Livermore Software Technology Corporation, Livermore, 1998.
- Hamashima, H., Kato, Y., Nadamitsu, Y., and Itoh, S., *Determination of JWL Parameters from underwater explosion test for ideal and non-ideal explosives*, *Science and Technology of Energetic Materials*, Vol. 64, No.6, pp.248-253, 2003.

- Hancock, S., PISCES 2DELK Theoretical Manual, Physics International, 1985.
- Harlow, F.H. and Welch, J.E., Numerical Calculation of Time-Dependent Viscous Incompressible Flow of Fluid with Free Surface, *The Physics of Fluids*, 8, pp. 2182,2189, 1965.
- Hirt, C.W. and Nichols, B.D., Volume of Fluid (VOF) - Method for the dynamics of free boundaries, *J. Comput. Phys.*, 39, 201-225, 1981.
- Holian, K.S., Mandell, D.A, Adams, T.F., Addressio, F.L., Baumgardner, J.R., and Mosso, S.J., MESA: A 3-D computer code for armor/anti-armor applications, *Proceedings of the Supercomputing World Conference*, San Francisco, 1989.
- Hughes, T.J.R. , Liu, W.K., and Zimmerman, T.K., Lagrangian-Eulerian finite element formulation for viscous flows, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, Vol. 29, 329-349, 1981.
- Hughes, T.J.R. and Tezduyar, T. E., Finite Element Methods for First-Order Hyperbolic Systems with Particular Emphasis on the Compressible Euler Equations, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 45, pp. 217-284, 1984.
- Hughes, T.J.R. , Mallet, M. , and Mizukami, A., A new finite element formulation for computational fluid dynamics: II. Beyond SUPG, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 54, 341-355, 1986.
- Itoh, S., Nagano, S., and Fujita, M., The features of the Assembly for Punching of Pipes by Using the Converging Underwater Shock Wave, *Proceedings of the Symposium of J. S. M. E.*, Vol.948-3, 1994.
- Itoh, S., Kira, A., Nagano, S., Fujita, M., Study on the Properties of Underwater Shock Wave from Explosion of High Explosives, *Journal of the Japan Industrial Explosives Society*, Vol.56, No.5, pp.188-194, 1995.
- Itoh, S., Nagano, S., Hamada, T., Murata, K., Kato, Y., High Pressure Generation Using Underwater Explosion of Spiral Detonating Cord, *ASME PVP Conf.*, PVP-Vol. 414-2 pp. 81-85, 2000.
- Itoh, S., Nagano, S., Hamada, T., Murata, K., and Kato, Y., Underwater shock focusing using the explosion of spiral detonating cord, *Proceedings of the 23rd International Symposium on Shock Waves*, pp.236, 2001.

- Itoh, S., Morimoto, H., Nagano, S., Otsuka, M., Hida, E., Kuroki K., Liu Z.Y., Characteristics of the Flying Metal Plate System Using Overdriven Detonation, Proc. of the ASME Pressure Vessels and Piping Conference, Vancouver, Canada, PVP-Vol.446-1, pp.143-148, 2002.
- Iyama, H., Hinata, T., Takahashi, K., Itoh, S., Numerical Simulation of Free Forming of Aluminum Alloy Using Underwater Shock Wave, Materials Science Forum, Vols. 465-466, pp. 391-396, 2004.
- Johnson, J.N., Mader, C.L., and Shaw M.S., 2DL: A Lagrangian Two-Dimensional Finite-Difference Code for Reactive Media, Los Alamos Scientific Laboratory report LA-8922-M, 1981.
- Johnson, G.R., Stryk, R.A., Petersen, E.H., Holmquist, T.J., Schonhardt, J. A., and Burns, C. R., User Instructions for the 1995 Version of the EPIC Code, Alliant Techsystems, 1994.
- Kerley, G.I., CTH Reference Manual: The Equation of State Package, Sandia National Laboratories report SAND91-0344, 1991.
- Kerley, G.I., CTH Equation of State Package. Porosity and Reactive Burn Models, Sandia National Laboratories report SAND92-0553, 1992.
- Keene, R. and Prior, A., MSC/DYTRAN User's Manual, The MacNeal-Schwendler Corporation, Part Number DT/A/000/UM, 1991.
- Key, S.W., HONDO - A Finite Element Computer Program for the Large Deformation Dynamic Response of Axisymmetric Solids, Sandia National Laboratory report 74-0039, 1974.
- Kuropatenko, V. F., in Difference Methods for Solutions of Problems of Mathematical Physics, I, ed., Janenko, N. N., American Mathematical Society, Providence, RI, 1967.
- Kury, J.W., Hornig, H.C., Lee, E.L., McDonnell, J.L., Ornellas, D.L., Finger, M., Strange, F.M., and Wilkins, M.L., Metal Acceleration by Chemical Explosives, 4th Symp. (International) on Detonation, White Oak, MD, pp. 3-13, October 12 - 15, 1965.
- Landshoff, R., A Numerical Method for Treating Fluid Flow in the Presence of Shocks, Los Alamos Scientific Laboratory LA-1930, 1955.
- Lee, E.L., Homig, H.C., and Kury, J.W., Adiabatic Expansion of High Explosive Detonation Products, report UCRL-50422, Lawrence Livermore Laboratory, 1968.

- Lenselink, H., and de Vries, E., Analysis of the Loading of an Aluminum Cylinder by an Underwater Explosion, 1994 MSC World Users' Conference, Lake Buena Vista, Florida, 1994.
- Liu, W.K., Zhang, Y.F., Belytschko, T., and Chen, J.S., Adaptive ALE Finite Elements with Particular Reference to External Work Rate on Frictional Interface, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 93, 189-216, 1991.
- Liu, W.K., Chang, H., J-S. Chen, and Belytschko T., Arbitrary Lagrangian-Eulerian Petrov-Galerkin finite elements for non-linear continua, *Comput. Methods in Appl. Mech. Engrg.* 68, N°3, 259-310, 1988.
- Logan, R.W., Tokarz, F.J., and Whirley, R.G., Crashworthiness: Planes, Trains, and Automobiles, *Energy & Technology Review*, 19-34, 1993.
- Luttwak, G., Florie, K., and Venis, A., Numerical Simulation of Soft Body Impact, in *Shock Compression of Condensed Matter - 1991*, North-Holland, Amsterdam, p. 999, 1992.
- Mader, C.L., Numerical Modeling of Detonations, Los Alamos Series in Basic and Applied Sciences, University of California Press Berkeley, 1979.
- Maenchen, G. and Sack, S., The TENSOR Code, *Methods in Computational Physics*, Vol. 3, Fundamental methods in Hydrodynamics, Academic Press, New York, 1964.
- Mandell, D.A., Adams, T.F., Mosso, S.J., Holian, K.S., Addressio, F.L., and Baumgardner, J.R., MESA: A 3-D computer code for armor/anti-armor applications, Los Alamos National Laboratory report LA-UR-89-1263, 1989.
- Matuska, D. A. and Osborn, J., HULL Documentation: Volume II, User's Manual, Orlando Technologies, Inc. Technical Report, 1986.
- McGlaun, J.M., CTH Reference Manual: Lagrangian Step for Hydrodynamic Materials, Sandia National Laboratories report SAND90-2645, 1990.
- McGlaun, J. M., Thompson, S. L., and Elrick, M. G., CTH: A Three-dimensional Shock Wave Physics Code, *International Journal of Impact Engineering* 10, 351-360, 1990.

- McGlaun, J.M., CTH Reference Manual: Cell Thermodynamics, Sandia National Laboratories report SAND91-0002, 1991.
- McKeown, R.M., Grande, R., and Mentges, J. M., Simulations of Underwater Explosions Against Submerged Structures Using the DYSMAS/ELC Code - Part B: 'Analysis of an Unstiffened Cylinder', Proceedings of the 65th Shock and Vibration Symposium II, 253-261, 1994.
- Merchant, P.W, White S.J. and Collyer A.M., A WBL-CONSISTENT JWLE Equation of State for the HMX-BASED Explosive EDC from cylinder tests, 12th International Detonation Symposium, 2002.
- Neely, J.R., Couch, R., Futral S., and Dube E., A Parallel 3D ALE Code for Metal Forming Analyses, Proceedings of the Fifth International Conference on Numerical Methods in Industrial Forming Processes - NUMIFORM '95, Shen & Dawson (eds.), A.A. Balkema, Rotterdam, ISBN 90 5410 553 4, 475-481, 1995.
- Noh, W.F., CEL: A time-dependent, two-space-dimensional, coupled Eulerian-Lagrange code, in Methods in Computational Physics, Vol. 3, Fundamental Methods in Hydrodynamics, Academic Press, New York, 117-179, 1964.
- Noh, W.F. and Woodward, P., SLIC (Simple line interface calculation), Fifth International Conference on Numerical Methods in Fluid Dynamics, Vol.59, 330-340, 1976.
- Odier, S., Approches microscopique et macroscopique des détonations (Livre), Edp Science, 2003
- Peery, J.S., Budge, K.G., Wong, M.K., and Trucano, T.G., RHALE: A 3-D MMALE Code for Unstructured Grids, ASME Winter Annual Meeting, 1993.
- Pelestor F., Initiation à la détonique, l'onde explosive, disponible sur : <http://membres.lycos.fr/plt/index.shtml>
- Pfrang, W.E., Luetje, H., and Freercks, J., Shock Response of a Mine Hunter due to Sea Ground Mine Explosions - Numerical Simulations, Proceedings of the 59th Shock and Vibration Symposium, Vol. II, 337-351, 1988.

- Pohl, W., Hoek, M.J. v.d., Buis, J.P., Florie, C.J.L., Hancock, S.L., Groenenboom, P.H.L., Hesselink, D.J.E., Lenselink, H., and Schaffers, P.J.J., The PISCES Software for Defense: A Survey of PISCES Code Applications for Defense-Orientated Computational Problems, PISCES International, Revision 2, 1984..
- Roache, P.J., Computational Fluid Dynamics, Hermosa Publishers, 1976.
- Sanai, M., Gefken, P.R., and Simons, J.W., Blast damage assessment methodology for terrorist bomb attacks on aircraft. SRI International, Menlo Park, CA, May 1995.
- Schittke, H.J., Mohr, W., Luetje, H., Pfrang, W.E., Freercks, J., and Niessen, E., The Program DYSMAS/ELC and its Application on Underwater Shock Loading of Vessels, Proceedings of the 60th Shock and Vibration Symposium IV, 55-78, 1989.
- Sharp, R.W. and Barton, R.T., HEMP Advection Model, Lawrence Livermore National Laboratory, UCID-17809 Rev.1, 1981.
- Silling, S.A., CTH Reference Manual: Johnson-Holmquist Ceramic Model, Sandia National Laboratories report SAND92-0576, 1992.
- Silling, S.A., CTH Reference Manual: Boundary Layer Algorithm for Sliding Interfaces in Two Dimensions, Sandia National Laboratories report SAND93-2487, 1994.
- Sod, G.A., A Survey of Several Finite Element Difference Methods for Systems of Nonlinear Hyperbolic Conservation Laws, Journal of Computational Physics, Vol. 27, pp. 1-31, 1978.
- Souli, M., Ouahsine, A. and Lewin, L., ALE formulation for fluid-structure interaction problems, Computer Methods in Applied Mech. and Eng. Vol.190, pp. 659-675, 2000.
- Souli, M. and Zolesio, J.P., Arbitrary Lagrangian-Eulerian and free surface methods in fluid mechanics, Comput. Methods Appl. Mech. Eng., 191, 451-466, 2001.
- Swegle, J.W., TOODY IV - A Computer Program for Two-Dimensional Wave Propagation, Sandia National Laboratories report SAND-78-0552, 1978.

- Swisdak, Jr., M.M., Explosion effects and properties: Part II - Explosion effects in water. Naval Surface Weapons Center, Silver Spring, MD. NSWC/WOL TR 76-116, 1978.
- Taylor, L.M. and Flanagan, D.P., PRONTO 2D - A Two Dimensional Transient Solid Dynamics Program, Sandia National Laboratories report SAND86-0594, 1987.
- Taylor, L.M. and Flanagan, D.P., PRONTO 3D - A Three Dimensional Transient Solid Dynamics Program, Sandia National Laboratories report SAND87-1912, 1989.
- Taylor, P.A., CTH Reference Manual: The Steinberg-Guinan-Lund Viscoplastic Model, Sandia National Laboratories report SAND92-0716, 1992.
- Taylor, P.A., CTH Reference Manual: The Transverse Isotropic (TI) Model, Sandia National Laboratories report SAND95-2750, 1995.
- Taylor, P.A., CTH Reference Manual: The Bammann-Chiesa-Johnson Viscoplastic/Damage Model, Sandia National Laboratories report SAND96-1626, 1996.
- Thompson, S.L., CSQ - A Two Dimensional Hydrodynamic Program with Energy Flow and Material Strength, Sandia Laboratories, SAND74-0122, 1975.
- Tipton R., CALE User's Manual, Lawrence Livermore National Laboratory, 1992.
- Van Leer, B., Towards the Ultimate Conservative Difference Scheme. IV. A New Approach to Numerical Convection, Journal of Computational Physics Vol.23, pp 276-299, 1977.
- Von Neumann, J. and Richtmyer, R.D., A Method for the numerical Calculation of Hydrodynamics Shocks, Journal of Applied Physics, Vol. 21, p. 232, 1950.
- Wang, J. and Gadala, M.S., Formulation and survey of ALE method in nonlinear solid mechanics, Finite Element in Analysis and Design, 24, 253-269, 1997.

- Whirley, R.G., Hallquist, J.O., DYNA3D - A Nonlinear, Explicit, Three-Dimensional Finite Element Code for Solid and Structural Mechanics - User Manual, Lawrence Livermore National Laboratory report UCRL-MA-107254, 1991.
- Wilkins, M., Calculation of Elastic-Plastic Flow, in Methods in Computational Physics, Vol. 3, Fundamental Methods in Hydrodynamics, Academic Press, 211-263, 1964.
- Wilkins, M.L., Use of Artificial Viscosity in Multidimensional Fluid Dynamic Calculations, Journal of Computational Physics, Vol. 36, pp. 281-303, 1980.
- Winslow, A.M., Equipotential Zoning of Two-Dimensional Meshes, Lawrence Radiation Laboratory, UCRL-7312, 1963.
- Winslow, A.M., Equipotential Zoning of The Interior of a Three-Dimensional Mesh, Report to LSTC, 1990.
- Yarrington, P., The CTH-EPIC Link - A Coupled Eulerian/Lagrangian Computational Method, Proceedings of the 12th U.S. National Congress on Computational Mechanics, 1994.
- Yarrington, P. and Prentice, J.K., A Coupled Eulerian/Lagrangian Method for Computational Continuum Dynamics Analysis, Bulletin of the American Physical Society, Program of the 1995 APS Topical Conference, Shock Compression of Condensed Matter, 40,6, p.1388, 1995.
- Youngs, D.L., Time-dependent multi-material flow with large fluid distortion, Numerical Methods for Fluids Dynamics, Ed. K. W. Morton, M.J. Baines, Academic Press, New-York, 1982.

Annexe : Publications

Numerical Studies of Wave Generation Using Spiral Detonating Cord

K. Mahmadi¹, S. Itoh², T. Hamada², N. Aquelet¹, M. Souli¹

¹Université de Lille, Laboratoire de Mécanique de Lille, UMR CNRS 8107, Bd Paul Langevin, 59655 Villeneuve d'Ascq, France

²Department of Mechanical Engineering and Materials Science, 2-39-1 Kurokami, Kumamoto City, Kumamoto 860-8555, Japan

Keywords: Shock waves, multi-material Eulerian formulation, detonating cord, underwater explosion.

Abstract. The control of underwater explosions is an industrial concern. In this paper, a comparison of experimental and numerical results of high-pressure generation using underwater explosion of spiral detonating cord is presented. To demonstrate that the converging process of underwater shock wave yields high pressure near the spiral center, the experimental investigation aims to compare underwater shock wave pressures obtained with several detonating cord geometrical configurations and study the wave converging process for a spiral cord. Because the experimental approach of these fast transient events is expensive and time-consuming, numerical simulations of experimental cases by using multi-material Eulerian formulation are carried out. The multi-material Eulerian, which is a particular multi-material ALE (Arbitrary Lagrangian Eulerian) formulation was successfully used in many industrial applications involving computational fluid dynamic problems. By using an explicit finite element method, a good agreement between numerical and experimental results will valid multi-material Eulerian formulation abilities to solve accurately underwater shock wave problems for spiral detonating cord in various shapes.

Introduction

In recent years, the various processing ways using shock waves from explosions in water results in new industrial developments as non-thermal food sterilization [1], punching technique [2], and others. It is necessary to make a control of underwater shock wave to meet the industrial demands. The controls include the convergence of underwater shock waves by an appropriate technique and the adjustment of the pressure distribution of shock wave in the application.

This study mainly focuses on the numerical investigations on the underwater explosion of detonating cord in a spiral shape to obtain the converging underwater shock wave in comparison with the experimental results [3,4]. Detonating cord is a high velocity non-electric blasting accessory, flexible, easy to use and extremely safe. Detonating cord has a core of pentaerythritoltetranitrate (PETN) covered with various layers of cotton yarns and synthetic fibers. PETN is one of the strongest known high explosives. The explosion of the spiral detonating cord will be expected to result in the convergence of shock available at the nearby of the spiral center, which generates the high shock pressure.

In recent years, the necessity for numerical analysis has been increasing. The numerical investigation described in this paper aims to model this physical phenomenon by using a multi-material Eulerian scheme. This formulation has already been used with success in the simulation of fluid with large motion such as the impact and penetration problems [5]. The main advantage of the Eulerian method is that the time steps can remain roughly constant during simulations in contrast to the Lagrangian formulation where the mesh undergoes large deformations in explosions problems. Because a hydrodynamic material model requires an equation of state to define the pressure-volume relationship, we use the Jones-Wilkins-Lee-Baker equation of state for detonating cord while the Mie-Grüneisen equation of state is used for water model. The comparison between numerical and experimental results will demonstrate the capability of the multi-material Eulerian method to treat underwater explosions for detonating cord in several forms.

Multi-material Eulerian formulation

The multi-material Eulerian method means that the material flows through a fixed mesh and two or more different materials can be mixed within the same fixed mesh.

Lagrangian phase. A Lagrangian phase is performed, in which the mesh moves with the material, in this phase the changes in velocity and internal energy due to the internal and external forces are calculated. The equilibrium equations are:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\rho \frac{\partial v_i}{\partial x_i}, \quad \rho \frac{\partial v_i}{\partial t} = \sigma_{ij,j} + \rho b_i, \quad \rho \frac{\partial e}{\partial t} = \sigma_{ij} v_{i,j} + \rho b_i v_i \quad (1)$$

where v_i is the velocity of the material, σ_{ij} is the Cauchy stress and e is the internal energy.

After the Lagrangian phase is performed, either the stress tensor, pressure and deviatoric stress should be equilibrated, but most mixture theories equilibrate only pressure, the pressure equilibrium is a non-linear problem, which is complex and expensive to solve. Skipping the stress equilibrium phase is assuming an equal strain rate for both materials, which is incorrect. For most problems, the linear distribution based on volume fraction of the volumetric strain during the Lagrangian phase also leads to incorrect results. The volume distribution should be scaled by the bulk compression of the two materials in the element. Now, to determine the volume distribution in a ALE cell, the material interface position must be known.

There are several methods to treat the material interface in a fluid problem; the common one is the MAC method, which involves Eulerian flow calculation and Lagrangian particle movement.

Another possible way of tracking interfaces is the use of the volume fractions of the elements, or the Young method [6]. This method is adapted in this paper for the two dimensional problems.

The interface position is used to calculate the volume of the fluid flowing across cell sides. The interface calculation prevents advection of very small fluxes between partially filled and empty elements. Instead fluid flow is transported from 'filled' element to 'empty' element and this change in volume will be monitored and used to 'fill-up' the element or increase its volume fraction.

Advection phase. In the second phase, the transport of mass, momentum and internal energy across the element boundaries is computed. This phase may be considered as a 're-mapping' phase. The displaced mesh from the Lagrangian phase is remapped into the initial mesh for an Eulerian formulation, or an arbitrary distorted mesh for an ALE formulation.

In this advection phase, we solve a hyperbolic problem, or a transport problem, where the variables are density, momentum per unit volume and internal energy per unit volume. Details of the numerical method used to solve the equations are described in detail in [6] and [7], where the Donor Cell algorithm, a first order advection method and the Van Leer algorithm, a second order advection method [8] are used. As an example, the equation for mass conservation is:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u) = 0 \quad (2)$$

These algorithms have already been described in detail by some authors [7,9].

Jones-Wilkins-Lee-Baker (JWL) equation of state used for detonating cord

We used this equation of state for detonating cord. The JWL equation-of-state was recently developed by Baker and is further described by Orosz [10]. The derived form of the equation of state is based on the Jones-Wilkins-Lee (JWL) form due to its computational robustness and asymptotic to an ideal gas at high expansions. Additional exponential terms and a variable Gruneisen parameter have been added to adequately describe the high pressure region above the Chapman-Jouguet state.

The JWL thermodynamic equation of state enables the accurate representation of the P-V behaviour of explosives. This relationship, which is an extension of the commonly used Jones-Wilkins-Lee relationship, can be expressed as

Table 1 JWL parameters for detonating cord

A1 (Mbar)	A2 (Mbar)	A3 (Mbar)	A4 (Mbar)	R2	R1	R3	R4
521.96	71.104	4.4774	0.97725	8.7877	44.169	25.072	2.2251

C (Mbar)	ω	$A\lambda_1$	$B\lambda_1$	$R\lambda_1$	$A\lambda_2$	$B\lambda_2$	$R\lambda_2$
0.1570	0.32357	12.257	52.404	43.932	8.6351	-4.9176	2.1303

$$p = \sum_{i=1}^5 A_i \left(1 - \frac{\lambda}{R_i V}\right) e^{-R_i V} + \frac{\lambda E}{V} + C \left(1 - \frac{\lambda}{\omega}\right) V^{-(\omega+1)}, \quad \lambda = \sum_{i=1}^5 A_i (A_{\lambda i} V + B_{\lambda i}) e^{-R_i V} + \omega \quad (3)$$

where V is the relative volume and $A_i, R_i, A_{\lambda i}, B_{\lambda i}, R_{\lambda i}, C,$ and ω are input constants defined above. Table 1 gives the JWL parameters for detonating cord.

Mie-Grüneisen equation of state used for water

In our study, the water was modelled with Mie-Grüneisen equation of state with the parameters as given in table 2.

The Mie-Grüneisen equation of state with cubic shock velocity-particle velocity defines pressure for compressed materials as

Table 2 Grüneisen parameters for water

ρ_0 (g/cm ³)	γ_0	C (mm/ μ s)	S
1.00	0.1	148	1.92

$$p = \frac{\rho_0 C^2 \mu \left[1 + \left(1 - \frac{\gamma}{2}\right)\right] \mu}{1 - (S-1)\mu} + \gamma_0 E \quad (4)$$

where C is the intercept of the particle velocity behind the shock front, $u_p,$ versus shock velocity, u_s curve respectively; S is the coefficient of the slope of the $u_s - u_p$ curve ($u_s = C + S u_p$); γ_0 is the initial Grüneisen gamma and $\mu = (\rho/\rho_0) - 1$. The Grüneisen gamma is defined by the Mie-Grüneisen equation of state, Equation(5) related the pressure, p to the internal energy per unit volume, E.

$$p = p_h + \gamma (E - E_h) \quad (5)$$

where the subscript h defined the Hugoniot jump values given by equations (6).

$$\rho_0 u_s = \rho (u_s - u_p), \quad p_h = \rho_0 u_s u_p, \quad E_h = p_h (V_0 - V) / 2 \quad (6)$$

The artificial viscosity method

A widely used method for correcting the discontinuities is the addition of an artificial viscosity, which spreads the shock wave over three or four mesh points and so regularized the discontinuity. Bulk viscosity is proposed in one spatial dimension by Von Neumann and Richtmyer [11]. They introduced a pressure-like term, designated q that is added consistently to the pressure, P, in all of the governing equations.

$$\rho \frac{\partial u}{\partial t} = - \frac{\partial (P + q)}{\partial x}, \quad \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial t} = - (P + q) \frac{\partial u}{\partial x} \quad (7)$$

Later researchers added a linear term to eliminate the remaining oscillations behind the shock [12].

$$q = C_q \rho (\Delta u)^2 + C_L a \rho |\Delta u| \quad (8)$$

where q is the shock viscosity, C_q is the quadratic viscosity coefficient, ρ is the density, Δu is the velocity jump across a shock, a is the speed of sound and C_L is the linear viscosity coefficient. Typical values used in calculations for C_q and C_L are 1.5 and 0.06 respectively.

Finite element models

Only cases V, VI, VII and VIII when $D_h=50\text{mm}$ are chosen for the numerical study. The explosion of a detonating cord generates an immense pressure in water. A detonation wave propagates at great constant speed (6308m/s). A chemical reaction occurs producing large quantities of gas in a short period of time. The density of detonating cord used is 1.2g/cm^3 .

The three-dimensional model represented in figure 1 has been discretized in the case V into 287745 8-noded brick elements and 319200 nodes. The ignition of the explosion is applied at the point O (2.3485, 0, 0). The position of pressure measurement is shown in figure 2, which sketches experimental devices.

Figure 3-5 present the model of the spiral detonating cord in water. The ignition of the explosion is applied at the point O (59, 0, 0) (Case VI), O (99, 0, 0) (Case VII), O (36.7145, 0, 0) (Case VIII).

Table 3 Experiment condition

FORM OF DETONATING CORD		LENGTH OF DETONATING CORD	D_h
(V) STRAIGHT		250mm	50mm
SPIRAL	(VI) $r1=60\text{mm}$	250mm	50mm
	(VII) $r1=100\text{mm}$	400mm	50mm
(VIII) CIRCLE		250mm	50mm

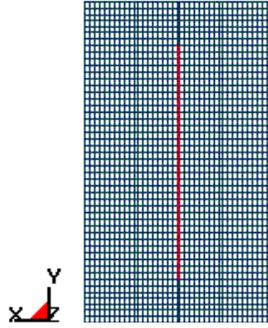


Fig.1 Model of case V, form of detonating cord: straight, $D_h=50\text{mm}$

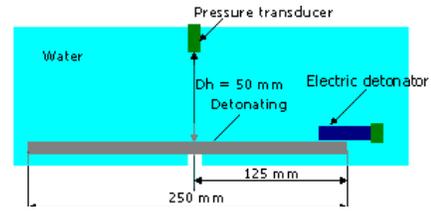


Fig.2 Case V, Form of detonating cord: Straight

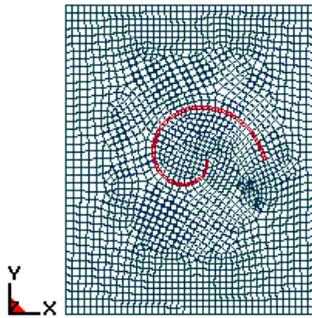


Fig. 3 Model of case VI

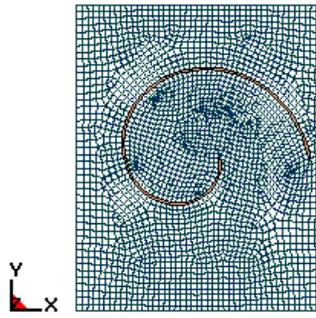


Fig. 4 Model of case VII

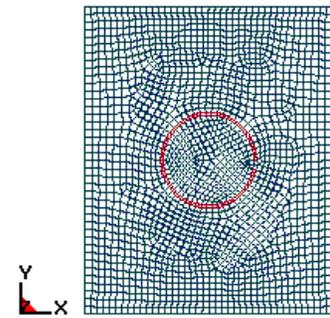


Fig. 5 Model of case VIII

NUMERICAL RESULTS

In this section, we present numerical results for several cases of detonating cord underwater explosion. The pressure histories with multi-material Eulerian formulation are plotted in figures 7, 9, 11 and 13. The numerical overpressure representing the pressure jump measured at $D_h=50\text{mm}$.

Figures 6(a) and (b) show the plots of pressures taken in the propagating process of the shock wave.

The plots have $5\ \mu\text{s}$ inter-frame time in figure 6(a) and in figure 6(b) is $2\ \mu\text{s}$. The objective of these plots is to indicate the convergence of underwater shock wave of the detonating cord. Both figure 6

(a) and figure 6(b) allow to show clearly the convergence of underwater shock wave when using spiral detonating cord.

Case V. The pressure history at $D_h=50\text{mm}$, for which the Eulerian results were captured, is as shown in figure 7. Experimental curve is presented in the same figure. The experimental overpressure is 176.5MPa while the numerical peak value is 175.88MPa . Figure 8 gives the propagation of pressure for case V at $t=12\ \mu\text{s}$, $24\ \mu\text{s}$ and $36\ \mu\text{s}$.

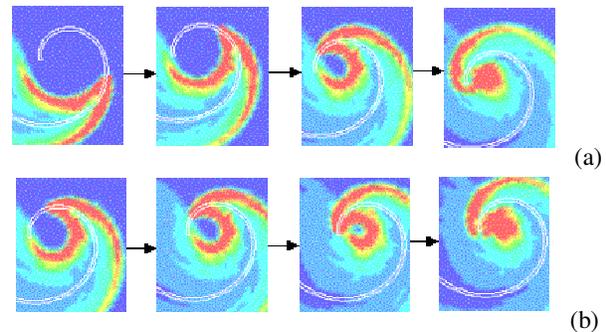


Fig. 6 Numerical plots of pressures

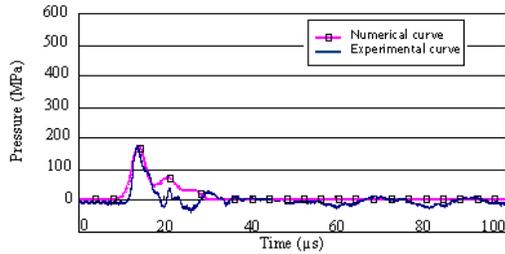


Fig. 7 Case V: Numerical and experimental curves of pressure-time at Dh=50mm

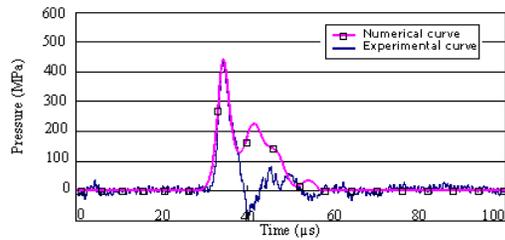


Fig. 9 Case VI: Numerical and experimental curves of pressure-time at Dh=50mm

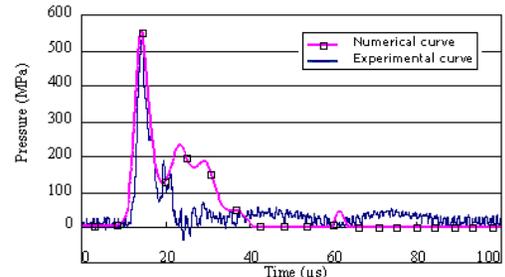


Fig. 11 Case VII: Numerical and experimental curves of pressure-time at Dh=50mm

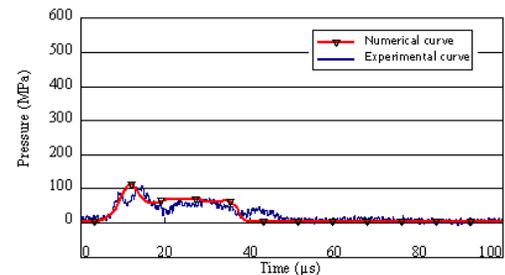


Fig. 13 Case VIII: Numerical and experimental curves of pressure-time at Dh=50mm

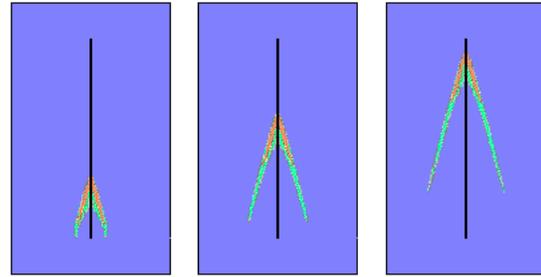


Fig. 8 Pressure profile at t=12μs, 24μs and 36μs

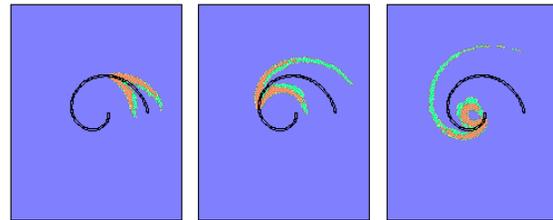


Fig. 10 Pressure profile at t=10μs, 20μs and 30μs

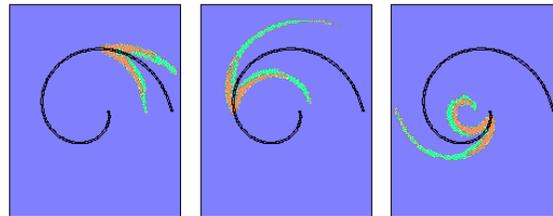


Fig. 12 Pressure profile at t=18μs, 36μs and 54μs

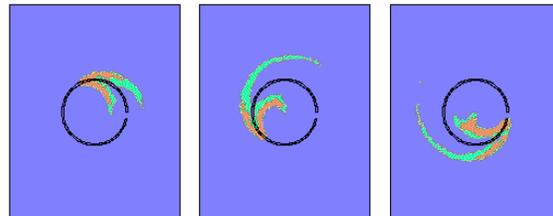


Fig. 14 Pressure profile at t= 12μs, 24μs and 36μs

Case VI. The pressure profile at Dh=50mm for which the detonating cord is spiral, is as shown in figure 9. Experimental curve is superposed in the same figure. The experimental overpressure is 440MPa while the numerical overpressure is 440.92MPa. Figure 10 shows the propagation of pressure for case VI at t=10μs, 20μs and 30μs.

Case VII. As shown in figure 11, experimental curve is superposed with numerical pressure history. The experimental peak value is 539.5MPa while the numerical overpressure is about 550.6MPa. Figure 12 gives the propagation of pressure for case VII at t=18μs, 36μs and 54μs.

Case VIII. Figure 13 gives the experimental curve superposed with the numerical curve. In this case, the experimental overpressure is 109.3MPa and the numerical overpressure is 106.77MPa. Figure 14 gives the propagation of pressure for case VIII at $t=12\mu\text{s}$, $24\mu\text{s}$ and $36\mu\text{s}$

Table 4 Comparisons of the pressure peak in experimental and numerical cases

	Overpressure (MPa)			
	CASE V	CASE VI	CASE VII	CASE VIII
Experimental results	176.5	440	539.5	109.3
Numerical results	175.88	440.92	550.6	106.77
Relative Error (%)	0.35	0.20	2.05	2.31

Table 4 presents the summary of the experimental and simulation overpressures. In the four cases, the relative error between the experimental and numerical jump pressure values show that the multi-material Eulerian formulation gives good agreement with experimental results.

Conclusions

This study demonstrates that the underwater shock wave from a specially designed spiral shape of detonating cord converges at the spiral center to increase the shock pressure. The impulse of shock wave also is able to be improved at distance $D_h=272\text{mm}$. A numerical investigation was presented in order to demonstrate the abilities of the multi-material Eulerian method to simulate the underwater explosion problems. Comparing the overpressure values at $D_h=50\text{mm}$ for several cases reveals a maximum relative error under 2.5%. The multi-material Eulerian formulation can predict the pressure history of underwater explosion from detonating cord in various shapes.

References

- [1] K. Fujiwara, T. Hiroe, M. Asaoka, Shock sterilization of dry powder foods, *Journal of Pressure Vessel Technology*, Trans. ASME, Vol. 460 (2003) pp 271-276.
- [2] S. Itoh, S. Nagano, M. Fujita, The features of the Assembly for Punching of Pipes by Using the Converging Underwater Shock Wave, *Proceedings of the Symposium of J. S. M. E.*, Vol.948-3, 1994.
- [3] S. Itoh, S. Nagano, T. Hamada, K. Murata and Y. Kato; "High Pressure Generation Using the Underwater Explosion of Spiral Detonation Cord", 2000 ASME PVP Conf., EMERGING TECHNOLOGIES IN FLUIDS, STRUCTURES, AND FLUID/STRUCTURE INTERACTIONS, July 2000, PVP-Vol. 414-2 pp. 81-85.
- [4] S. Itoh, T. Hamada, S. Nagano, K. Murata and Y. Kato; "Underwater shock focusing using the explosion of spiral detonating cord", *The 23rd Inter. Symp. on Shock Waves*, Fort Worth, Texas, USA, July, 2001, p236
- [5] D.J. Benson, A Multi-Material Eulerian Formulation for the efficient solution of impact and penetration problems, *Computational Mechanics*, Vol.15 (1995) pp 558-571.
- [6] D.L. Young, Time-dependent multi-material flow with large fluid distortion, *Numerical Methods for Fluids Dynamics*, Ed. K. W. Morton and M.J. Baines, Academic Press, New-York (1982).
- [7] D. J. Benson, Momentum Advection on a Staggered Mesh, *Journal of Computational Physics*, Vol.100, No.1 (1992) pp.143-162.
- [8] B. Van Leer, Towards the Ultimate Conservative Difference Scheme. IV. A New Approach to Numerical Convection, *Journal of Computational Physics* Vol.23 (1977) pp 276-299.
- [9] M. Souli, A. Ouahsine and L. Lewin, ALE formulation for fluid-structure interaction problems, *Computer Methods in Applied Mech. and Eng.* Vol.190 (2000) pp659-675.
- [10] J.O. Hallquist, LS-DYNA, Theoretical Manual, Livermore Software Technol. Corp., Livermore, 1998.
- [11] J. Von Neumann, R.D. Richtmyer, A method for the numerical calculation of hydrodynamics shocks, *J. Appl. Phys.* Vol. 21 (1950).
- [12] D.J. Benson, Computational methods in Lagrangian and Eulerian hydrocodes, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* Vol.99 (1992) pp235-394.

Numerical Study of Overdriven Detonation Phenomenon

K. Mahmadi¹, M. Souli, N. Aquelet

Laboratoire de Mécanique de Lille, Bd Paul Langevin
59655 Villeneuve d'Ascq, France

¹ K.Mahmadi@ed.univ-lille1.fr

Keywords: Overdriven detonation, shock wave, shock-structure interaction.

Abstract

The overdriven detonation refers to detonation process in which the main detonation parameters, such as detonation pressure and propagating velocity, exceed the corresponding Chapman-Jouguet (C-J) values. This kind of detonation can be occurred when the flyer plate of high velocity impacts the explosive. So, in this work numerical simulation of overdriven detonation (following O.D.D.) phenomenon, which brings out higher detonation pressures than C-J pressure of an explosive is considered. The shock-structure interaction in this fast event is modeled by a penalty coupling, which permits to couple a Lagrangian mesh of the plate to material points of a multi-material Eulerian flow. This technique has been used successfully in many areas of applications, including automotive and industrial fields. By using an explicit finite element method, a good agreement between numerical and experimental results will valid penalty coupling capabilities to solve accurately O.D.D. phenomenon.

1 Introduction

The pressure of an explosive is limited by its own property and its own performance. This pressure is called Chapman-Jouguet (C-J) pressure. In the litterature [1,2], Overdriven detonation is an explosion for which the detonation pressure and velocity are higher than that of the Chapman-Jouguet state. O.D.D. phenomenon of high explosive is taken notice in the new material development field in recent years. This phenomenon can occur when the metal plate accelerates by donor explosive impact against acceptor explosive [2]. The numerical tool used for studying this fast event is an explicit finite element code Ls-Dyna. A shock-structure interaction algorithm is treated by a penalty coupling to modeling two superposed meshes, an Eulerian fixed mesh for the fluid and a Lagrangian deformable mesh for the aluminum plate. This method was successfully used in many different types of applications such as the bird strike and helicopter ditching in the aeronautics field, the airbag deployment in automotive industry, etc.

Comparisons between numerical and experimental detonation velocities are given and will demonstrate the capability of penalty coupling to treat numerically overdriven detonation problems.

2 Shock-structure interaction

It is well known that in the last decades fluid-structure interaction has become one of the most challenging problems in scientific computing. High speed interaction between a structure and a fluid requires simultaneous modeling of large deformations of structures and shock propagation in fluids. This algorithm can be roughly described by the following two steps: In the first step force and mass contributions from master elements to slave elements are computed. Secondly, using the new forces and masses, the accelerations of master nodes are updated. Using a Euler/Lagrange coupling is interesting for shock-structure interaction problems because, first, the multi-material Eulerian formulation, which is the technique where the nodes stay fixed in space and where each element is allowed to contain a mixture of different materials, models large deformations and second, penalty coupling treats shock-structure impacts. As soon as an Eulerian node penetrates a Lagrangian structure, a force of recall is exerted on the contravening node and put it back on the surface of the structure, i.e. for each Lagrangian node, a search of a Eulerian element containing this node is done. Penalty forces are calculated proportional to the penetration velocity. In this work, penalty coupling allows us to treat numerically O.D.D. problem and manages the interactions between a Lagrangian formulation modeling the flying plate and a multi-material Eulerian formulation modeling the fluid.

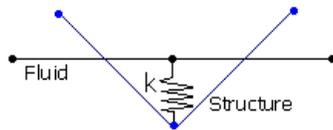


Figure 1 : Penalty coupling

The penalty method imposes a force of recall to the slave node (see Fig.1) proportional to the penetration through the master segment:

$$F = -k \cdot d \quad (1)$$

where F , d and K are respectively the force, the penetration and the stiffness of a spring.

The stiffness coefficient for master segment is given by Eq(2) in terms of the bulk modulus K , the volume V and the face area A of the element containing the segment:

$$k = \frac{fKA^2}{V} \quad (2)$$

where f is a scalar factor, known as penalty factor.

3 Multi-material Eulerian formulation

The Lagrangian finite element formulation uses a computational mesh that follows the material deformation. This approach is efficient and accurate for problems involving moderate deformations like structure motions or flows that are essentially smooth. If the material is subjected to large deformations, Lagrangian meshes are strongly distorted which jeopardizes the simulation because distorted elements have low accuracy and their stable time step sizes are small for explicit time integration algorithms. A multi-material Eulerian technique is a method where the material flows through a mesh that is completely fixed in space and where each element is allowed to contain a mixture of different materials. The method completely avoids element distortions and it can be coupled with a Lagrangian description of motion.

The Eulerian and more generally Arbitrary Lagrangian Eulerian (ALE) approaches are based on the arbitrary movement of a reference domain which, additionally to the common material domain and spatial domain, is introduced as a third domain, as detailed in [3]. The Eulerian equations are derived by assuming that the velocity of the reference configuration is zero and that the relative velocity between the

material and the reference configuration is therefore the material velocity.

In the operator-split method used for Eulerian and ALE formulations, the governing equations are split into two parts. In Lagrangian step, the finite element mesh follows the material deformation in the Lagrangian step. The momentum and energy equations are:

$$\rho \frac{\partial v_i}{\partial t} = \sigma_{ij,j} + \rho b_i \quad (3)$$

$$\rho \frac{\partial e}{\partial t} = \sigma_{ij} v_{i,j} + \rho b_i v_i$$

where v_i is the material velocity, σ_{ij} is the Cauchy stress and e is the internal energy.

In advection phase, the transport of mass, momentum and internal energy across the element boundaries is computed. The displaced mesh from the Lagrangian phase is remapped into the initial mesh for an Eulerian formulation.

We solve a transport problem, where the variables are density, momentum per unit volume and internal energy per unit volume. The equations of mass, momentum and energy conservation are respectively:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + v \nabla \rho = 0$$

$$\rho \frac{\partial v}{\partial t} + \rho v \nabla v = 0 \quad (4)$$

$$\rho \frac{\partial e}{\partial t} + \rho v \nabla e = 0$$

4 Multi-material interface tracking

In an Eulerian calculation the grid remains fixed in space, and materials flow through it. This means that material interfaces may cut through cells. One of the most difficult tasks in a multi-material Eulerian scheme is to adequately follow these material interfaces. A number of different approaches have been used to address

this problem. The two commonly used techniques are MAC and VOF techniques.

The marker and cell (MAC) method, proposed in 1965 by Harlow and Welch [4], works with the regions occupied by fluid. The velocity of the markers is found first by locating the fluid cell containing the particle and taking the average velocities of the cell nodes. While the MAC method is simple, it is expensive in computer time and memory.

In volume tracking method, f-field is defined.

- $f = 0$: No fluid in cell.
- $f = 1$: Cell filled with fluid.
- $0 < f < 1$: Cell partially filled with fluid.

The Simple Line Interface Calculation (SLIC) algorithm by Noh and Woodward (1976) [5] is one of the earliest algorithms, describing a method for geometric approximation of fluid interfaces. Their algorithm produces interfaces, which are drawn parallel to either the X or Y axes (see Fig. 2).

In this study, the technique used is the Young's VOF method, which is based on the original formulation of Hirt and Nichols (1981) [6]. It represents interfaces more accurately. In this technique, Volume fractions of either material for the cell and its eight surrounding cells are used to determine the slope of the interface (see Fig. 3). The position of the interface divides the cell into two areas which match the two volume fractions. Interface slope and fluid position are determined from inspection of 8 neighboring cells.

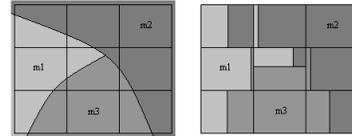


Figure 2 : SLIC technique

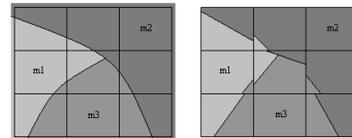


Figure 3 : Young's VOF technique

5 Equation of state used for the PBX explosive

Equations of state attempt to describe the relationship between temperature, pressure, and volume for a given material. The pressure in detonation products of explosive is calculated by using the JWL (Jones-Wilkins-Lee) equation of state, eq. (5).

$$p = A \left(1 - \frac{\omega}{R_1 V} \right) \exp(-R_1 V) + B \left(1 - \frac{\omega}{R_2 V} \right) \exp(-R_2 V) + \frac{\omega}{V} E \quad (5)$$

where p is the pressure, V is the relative volume, while A , B , C , R_1 , R_2 and ω are JWL parameters. The performance values for PBX explosive are given in Table 1. The C-J pressure is 0.37 Mbar for the PBX used, its density is 1.84g/cm^3 , its detonation velocity is $0.88 \text{cm}/\mu\text{s}$, and its initial energy per unit volume E_0 is 0.102 Mbar.

A (Mbar)	B (Mbar)	R_1	R_2	ω
8.5240002	0.1802000	4.5999999	1.3	0.38

Table 1 : JWL parameters for PBX explosive

6 Modeling and results

The ignition point was placed at the center of the cylinder ($x=0, y=0, z=0$). Two planes of symmetry ($x=0$ and $y=0$) are applied. The discretization of the donor and acceptor explosives charges and fluid is quarter mesh. Figure 4 shows the overdriven detonation modeling.

- **Case 1: a=5mm, b=45mm, Thickness of plate 0.5mm.**

This case corresponds to the following: length of donor explosive is 5mm, length of acceptor explosive is 45mm, diameter of explosives is 36mm and thickness of plate is 0.5mm. For this model, we use 109480 8-node solid elements (see Fig. 5). The elements used to model the plate are four nodes Belytschko-Lin-Tsay shell elements. Because of its computational efficiency, the Belytschko-Lin-Tsay shell

element is usually the shell element formulation of choice. This formulation is based on a combined co-rotational and velocity strain formulation [7]. Figure 6 shows the plate at its initial state and at $t=5\mu\text{s}$.

The pressure imminent from the donor explosive allows to the flying plate metal to advance with a high speed towards the acceptor explosive, which detonates the acceptor explosive. Figure 7 shows pressure plots corresponding to times $2\mu\text{s}$, $4\mu\text{s}$ and $5\mu\text{s}$. Figure 8 illustrates the history of two distant elements of 15mm, taken to calculate the detonation velocity numerically. The two curves present a jump of pressure called peak, due to the shock wave. The difference in shock arrival times is calculated to give detonation velocity: $t_1 = 6.8228\mu\text{s}$ and $t_2 = 8.4479\mu\text{s}$. $V_d = D / (t_2 - t_1) = 9230.20 \text{m/s}$ where D is the distance of the two considered elements ($D=15 \text{mm}$).

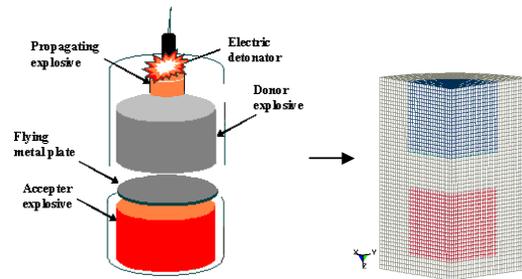


Figure 4 : Overdriven detonation modeling

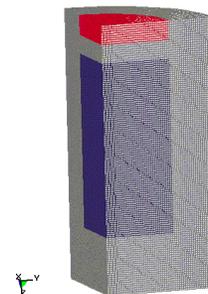


Figure 5 : Finite element model of case 1

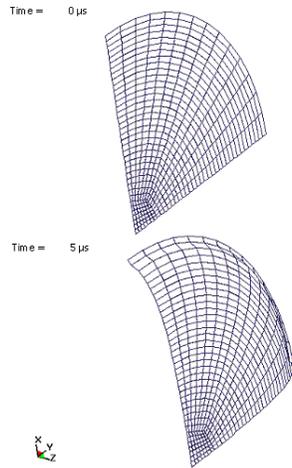


Figure 6 : Flying metal plate at $t=0\mu s$ and $t=5\mu s$

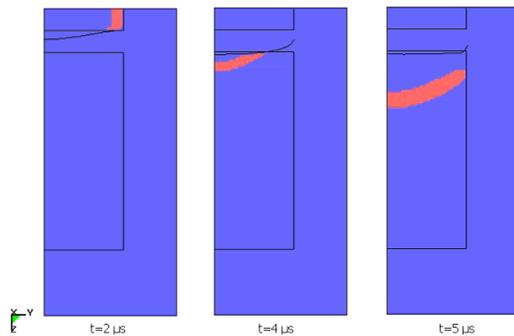


Figure 7 : Pressure propagation at $t=2\mu s$, $4\mu s$ and $5\mu s$

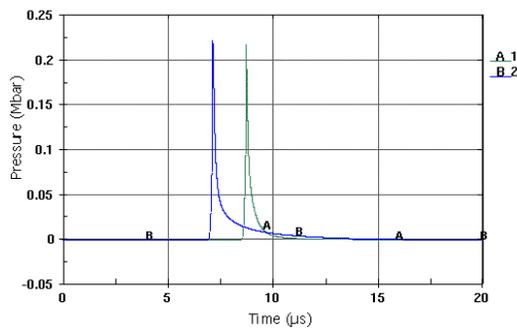


Figure 8 : History of pressure concerning two distant elements of 15mm

- **Case 2: $a=10\text{mm}$, $b=40\text{mm}$, Thickness of plate 1mm.**

109480 8-node solid elements are used to modeling this case (see Fig. 9). Figure 10 gives pressure plots at $t=2\mu s$, $5\mu s$ and $7\mu s$. Figure 11

illustrates the history of two distant elements of 15mm. Shock arrival times are respectively: $t_1= 7.1439\mu s$, $t_2= 8.7419\mu s$, and detonation velocity is: $V_d = D / (t_2 - t_1) = 9386.73 \text{ m/s}$



Figure 9 : Finite element model of case 2

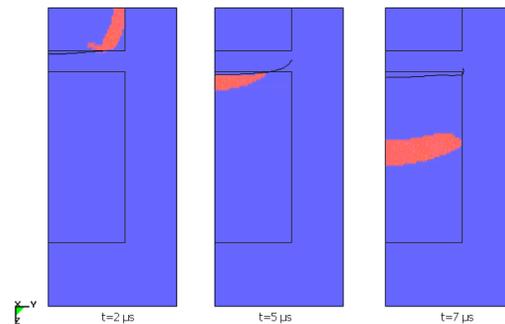


Figure 10 : Pressure propagation at $t=2\mu s$, $5\mu s$ and $7\mu s$

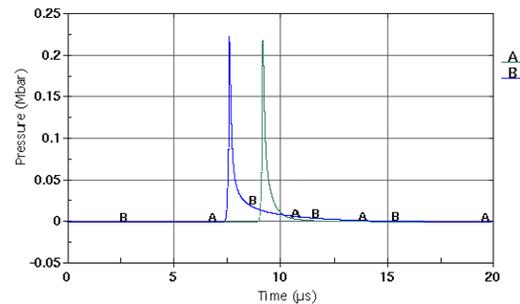


Figure 11 : History of pressure concerning two distant elements of 15 mm

- **Case 3: $a=10\text{mm}$, $b=30\text{mm}$, Thickness of plate 1mm.**

93380 8-node solid elements are used for modeling this case (see Fig. 12). Figure 13 shows pressures plot at $t=2\mu s$, $5\mu s$ and $6\mu s$. Figure 14 illustrates the history of two distant

elements of 15mm. Shock arrival times are respectively : $t_1 = 6.2678\mu\text{s}$, $t_2 = 7.8247\mu\text{s}$, and detonation velocity is:
 $V_d = D / (t_2 - t_1) = 9634.53 \text{ m/s}$

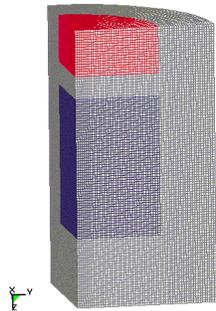


Figure 12 : Finite element model of case 3

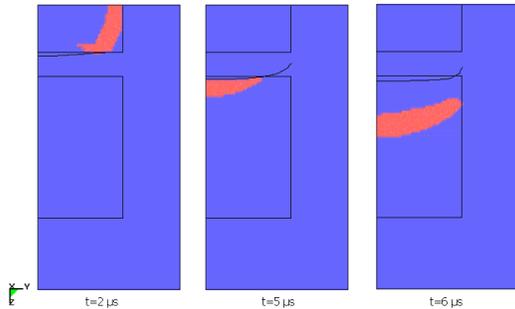


Figure 13 : Pressure propagation at $t=2\mu\text{s}$, $5\mu\text{s}$ and $6\mu\text{s}$

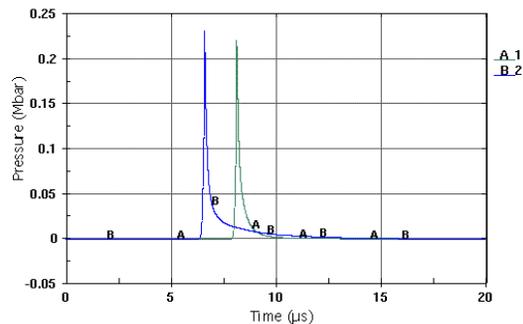


Figure 14 : History of pressure concerning two distant elements of 15mm

- **Case 4: $a=10\text{mm}$, $b=20\text{mm}$, Thickness of plate 0.5mm.**

For this model, we use 77280 8-node solid elements (see Fig. 15). Figure 16 shows the propagation of the pressure at $t=1\mu\text{s}$, $4\mu\text{s}$ and $t=5\mu\text{s}$. Figure 17 illustrates the history of two distant elements of 15mm where shock arrival

times are: $t_1 = 4.3095\mu\text{s}$, $t_2 = 5.8189\mu\text{s}$. Detonation velocity is:
 $V_d = D / (t_2 - t_1) = 9937.72 \text{ m/s}$

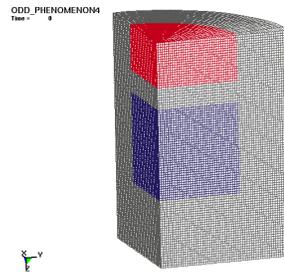


Figure 15 : Finite element model of case 4

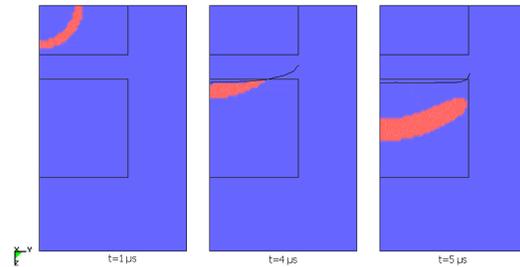


Figure 16 : Pressure propagation at $t=1\mu\text{s}$, $4\mu\text{s}$ and $5\mu\text{s}$

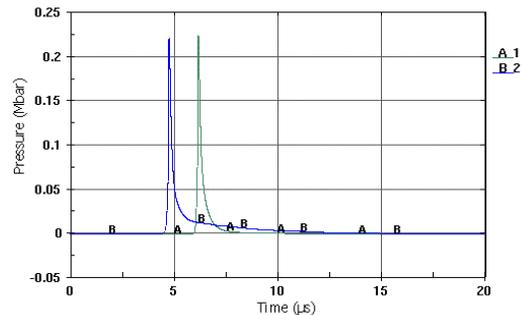


Figure 17 : History of pressure concerning two distant elements of 15mm

Case	Detonation velocity (m/s) Experimental results	Detonation velocity (m/s) Numerical results	Relative error
1	9118	9230.20	1.23%
2	9363	9386.73	0.25%
3	9740	9634.53	1.08%
4	10000	9937.72	0.62%

Table 2 : Summary table of measurements and numerical results

6 Conclusion

In this study, the O.D.D. phenomenon is simulated using coupling algorithm. Detonation velocities for several cases are compared to velocities measured with optical fiber. Comparisons show good correlation and reveal a maximum relative error under 1.25%. The shock-structure coupling can predict the detonation velocities of the overdriven detonation.

References

- [1] S. Itoh, H. Morimoto, E. Hida, K. Kuroki and Z.Y. Liu, Characteristics of the flying metal system using overdriven detonation, PVP2002-1472, PVP-Vol.446-1, Emerging Technologies in Fluids, Structure, and Fluid/Structure Interactions, ASME 2002, Vancouver (Canada) August 5-9 2002.
- [2] S. Itoh, S. Kubota, S. Nagano and M. Fujita, On Generation of Ultra-High Pressure by Converging of Underwater Shock Waves, Transactions of the ASME, Journal of Pressure Vessel Technology, Vol.120, No.1, pp.51-55, (1998).
- [3] T.J.R. Hughes, W.K. Liu, T.K. Zimmerman, Lagrangian-Eulerian Finite Element Formulations for Incompressible Viscous Flows, Computer Methods Appl. Mech. Eng., Vol. 29, pp. 329-349, (1981).
- [4] F.H. Harlow and J.E. Welch, Numerical Calculation of Time-Dependent Viscous Incompressible Flow of Fluid with Free Surface, The Physics of Fluids 8 (1965), pp. 2182,2189.
- [5] W.F. Noh and P. Woodward, SLIC (Simple line interface calculation), Fifth International Conference on Fluid Dynamics, 330-340, (1976).
- [6] C.W. Hirt, and B.D. Nichols, Volume of Fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries, J. Comput. Phys., 39, 201, (1981).
- [7] T. Belytschko and C.S. Tsay, Explicit Algorithms for Nonlinear Dynamics of Shells, AMD-Vol.48, ASME, 209-231 (1981).

New Mesh Relaxation Technique in Multi-Material ALE Applications

K. Mahmadi , N. Aquelet , M. Souli

*Université de Lille, Laboratoire de Mécanique de Lille, UMR CNRS 8107,
Bd Paul Langevin, 59655 Villeneuve d'Ascq, France*

Abstract

The Arbitrary Lagrangian-Eulerian (ALE) method is a method that contains both pure Lagrangian and pure Eulerian formulations. It is assumed to be capable to control mesh geometry independently from material geometry. However for transient problems involving pressure wave, this method will not allow to maintain a fine mesh in the vicinity of the shock wave for accurate solution. A new mesh relaxation method for explicit multi-material arbitrary Lagrangian Eulerian finite element simulations has been developed to keep an as "Lagrange like" fluid mesh as possible as in the vicinity of shock fronts, while at the same time keeping the mesh distortions on an acceptable level. However, the relaxation parameter must be defined for general applications of high pressures, it is the objective of this work. In this paper we present numerical results of three shock waves problems. For every application, numerical results will be compared with the experimental results in order to improve to understanding how the relaxation parameter is chosen.

1. Introduction

The principle of the ALE method is based on the independence of the finite element mesh movement in respect with the material motion. In fact, the freedom in moving the mesh offered by the ALE formulation comes from a combination of advantages of both Lagrangian and Eulerian methods. With the Lagrangian methods, the computational mesh moves with the material, which greatly simplifies the governing equations. Lagrangian schemes have proven very accurate as long as the mesh remains regular. However, the material may undergo large deformations that lead to severe mesh distortions and thereby accuracy losses and a reduction of the critical time step.

In an Eulerian formulation, the mesh is fixed in space and the material passes through the element grid. The transport of mass between elements complicates the governing equations by introducing nonlinear transport terms. Advection algorithms need to be implemented for the mass, momentum and internal energy conservation and for the tracking of all state variables. However, There are two drawbacks with an Eulerian formulation: the computational cost per cycle and the

dissipation errors generated when treating the advective terms in the governing equations.

However for transient problems involving high pressures, the ALE method will not allow to maintain a fine mesh in the vicinity of the shock wave for accurate solution. This paper aims to present the abilities of the arbitrary Lagrangian Eulerian new features to treat fast transient problems involving overpressure propagation.

The outline of this paper is arranged as follows. In Section 2 a general description of the multi-material ALE formulation is described. Section 3 is devoted to new technique of delaying the mesh relaxation. In Section 4, several numerical shock wave problems are presented, illustrating the performance of the introduced relaxation technique. The first application is an underwater explosion of spiral detonating cord detonation. The second application is a high explosive detonation in air. The third example is a high explosive detonation when a wall is placed at 4 feet from explosive charge.

2. The overall ALE strategy

In the ALE description, an arbitrary referential coordinate is introduced in addition to the Lagrangian and Eulerian coordinates. A spatial coordinate in space is denoted x and X is a material coordinate. The spatial velocity of the reference system is denoted $u(x,t)$, where t is the time. $v(x,t)$ is the material velocity at the same time and point in space. The relative velocity between a particle and the reference system $w = v - u$ is introduced to simplify the equations. σ_{ij} is the Cauchy stress and e is the internal energy. The evolution of a state variable in the reference system can be expressed as

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{df}{dt} - w_i \frac{\partial f}{\partial x_i} \quad (1)$$

The ALE mass, momentum and energy conservation equations are written in. (2), (3) and (4) respectively.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\rho \frac{\partial v_i}{\partial x_i} - w_i \frac{\partial \rho}{\partial x_i} \quad (2)$$

$$\rho \frac{\partial v_i}{\partial t} = (\sigma_{ij,j} + \rho b_i) - \rho w_j \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \quad (3)$$

$$\rho \frac{\partial e}{\partial t} = (\sigma_{ij} v_{i,j} + \rho b_i v_i) - \rho w_j \frac{\partial e}{\partial x_j} \quad (4)$$

There are two ways to implement the ALE equations and they correspond to two approaches [1,2]. The first way solves the fully coupled equations for computational fluid mechanics [3,4,5]. Although these approaches are theoretically accurate, the greatest disadvantage of these formulations is the advection of element centered variables as the stress field. The alternative approach is referred to as an operator split in the mathematics literature. First, the Lagrangian step is performed.

$$\rho \frac{\partial v_i}{\partial t} = \sigma_{ij,j} + \rho b_i \quad (5)$$

$$\rho \frac{\partial e}{\partial t} = \sigma_{ij} v_{i,j} + \rho b_i v_i \quad (6)$$

In the second phase called advection phase, the solution is mapped from the distorted Lagrangian mesh to the reference mesh to complete the ALE step. This phase may be considered as a ‘re-mapping’ phase. In this remap step, the transport of mass, momentum and internal energy across the element boundaries is computed. The displaced mesh from the Lagrangian phase is remapped into the initial mesh for an Eulerian formulation, or an arbitrary distorted mesh for an ALE formulation.

In this advection phase, we solve a hyperbolic problem, or a transport problem, where the variables are density, momentum per unit volume and internal energy per unit volume. Details of the numerical method used to solve the equations are described in detail in [6] and [7], where the Donor Cell algorithm, a first order advection method and the Van Leer algorithm, a second order advection method [8] are used.

The ALE code used in this paper allows several materials within one element. The amount of each material in a element must be established accurately. The VOF (Volume of Fluid) method or Young method is used to track the material interfaces. This method is adapted in this paper for the two dimensional problems. In this method, the material layout is described solely by the volume fraction of the fluid material in the element. Specifically, a straight line using the SLIC technique (Simple Linear Interface Calculation) of Woodward and Collela [9] approximates the interface in the cell. Interfaces are initially drawn parallel to the element faces. Then nodal volume fraction is computed to each node based on the fraction volumes of elements that share the same node. This volume fraction

determines the slope of the material interface inside the element. The position of the interface is then adjusted so that it divides the element into two volumes, which correctly matches the element volume fraction. The VOF method is attractive for solving a broad range of non-linear problems in fluid and solid mechanics, because it allows arbitrary large deformations and enables material interfaces to evolve.

3. Delayed Mesh Relaxation Technique

The relaxation technique presented in this study is mainly designed for multi-material ALE formulation, which is a method where two or more different materials can be mixed within the same fixed mesh. The ALE relaxation technique has been implemented and tested in the explicit Finite Element code LS-DYNA.

3.1 Lagrangian Phase

In the Lagrangian phase of a cycle, the solution is advanced from t^n to t^{n+1} . Velocities are computed at $t^{n+1/2}$ while accelerations and coordinates at t^{n+1} .

Knowing the mass, m , of a node and the force, f^n , acting on it, the acceleration is easily computed as

$$a^n = \frac{f^n}{m} \quad (7)$$

Once the acceleration is computed, the material velocity can be updated from t^n to t^{n+1} .

$$u^{n+1/2} = u^{n-1/2} + a^n \Delta t^{n+1/2} \quad (8)$$

where

$$\Delta t^{n+1/2} = \frac{1}{2} (\Delta t^n + \Delta t^{n+1}) \quad (9)$$

Subsequently, the Lagrangian node coordinate at t^{n+1} is computed.

$$x^{n+1} = x_R^n + u^{n+1/2} \Delta t^{n+1} \quad (10)$$

x^{n+1} is the updated Lagrangian node coordinate at t^{n+1} and x_R^n is the relaxed node coordinate after the advection phase at t^n .

3.2 Mesh Relaxation Phase

For some problems such as detonation, the element grid after the Lagrangian phase is rather distorted and a mesh relaxation phase is necessary to prevent a dropping time step size and, eventually, a negative Jacobian of some elements. Relaxation algorithms used in most explicit codes, to handle more general situations, are linear combinations of the equipotential, simple average and volume average methods, as described in [5]. The problem of the classical ALE formulation for shock and pressure wave problems is maintaining a fine mesh near the shock. Most of the methods for grid relaxation, the Winslow method developed in [10], the Winslow-Crowley or the modified Winslow-Crowley grid relaxation algorithms developed in [10] and implemented in hydrocodes, tend to control the grid spacing and produce a nearly uniform mesh in spherical and rectangular domains.

The method proposed in this work does not involve any equation systems and it is easily implemented in existing Finite Element codes. The method is a simple function that operates on the configuration produced by an arbitrary relaxation scheme. To better capture the physics in the vicinity of shock fronts, the function delays the mesh relaxation.

$$x_R^{n+1} = x^n + \eta \left(\overline{x_R^{n+1}} - x^{n+1} \right) \Delta t^{n+1} \quad (11)$$

$\overline{x_R^{n+1}}$ is a node coordinate provided by a mesh relaxation algorithm, operating on the Lagrangian configuration at t^{n+1} and η is a relaxation delay parameter. The definition of η used in this work is

$$\eta = \eta(\Delta t_N) = \alpha \max \left(1, \frac{\beta}{\Delta t_N} \right) \quad (12)$$

α and β are input parameters and Δt_N is the smallest critical time step of those elements connected to the node. The reference system velocity, if advancing from t^n to t^{n+1} , becomes

$$u_R^{n+\frac{1}{2}} = u^{n+\frac{1}{2}} + \eta \left(\overline{x_R^{n+1}} - x^{n+1} \right) \quad (13)$$

There are essentially two positive effects from forcing the mesh to partially follow the shock wave. Firstly, the mesh will contract in regions of large pressure gradients, which is beneficial for the accuracy in the Lagrangian phase of the simulation. Secondly, minimizing the advective fluxes in high gradient regions reduces dissipation and dispersion errors in the advection phase.

4. Numerical Applications

The investigations described in this section aims to model the physical phenomenon for three different high explosive blast models. A good relaxation scheme should manage to keep the mesh distortions on an acceptable level, while at the same time allow the mesh to follow the shock waves as well as possible.

4.1. Spiral Detonating Cord

Because this application mainly deals with underwater explosion of the spiral shape of detonating cord, the shape of the spiral cord is important. As shown in Figure 1, the detonating cord is bent into a spiral shape starting from point P_1 [11]. When the detonating cord is detonated from this point, the underwater shock waves beginning at this point and the following points, $P_1 - P_n$, spread out gradually. The distance, D_h , between the detonating cord and the transducer was set to be 50 mm. $r_1=60$ mm, the length of Detonating Cord is 250mm. There are 68586 nodes and 61025 elements in the model. The elements are 8-noded brick elements. The ignition of the explosion is applied at the point O (59, 0, 0).

In Figure 2, both experimental and numerical curve are presented. The peak of pressure for experimental study is 440MPa, while the numerical overpressure using the delayed mesh relaxation technique is 447.49MPa.

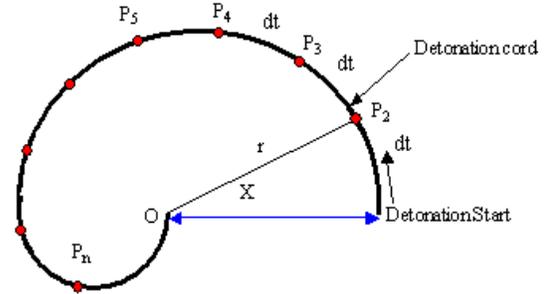


FIG. 1. Spiral model

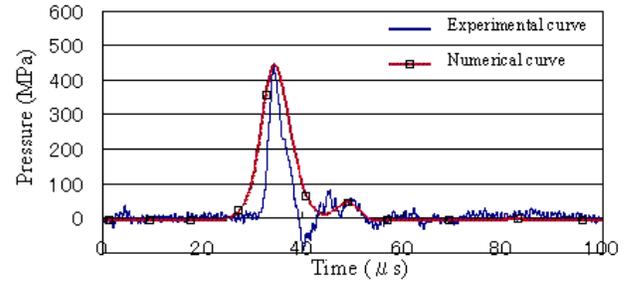


FIG. 2. Numerical and Experimental pressure history at $D_h=50$ mm for detonating cord detonation

4.2. Three-dimensional Detonation in air

The high explosive material in this example is C-4 and is assumed to have a spherical shape. The discretization of the C-4 explosive charge and fluid is one-eighth spherical mesh composed of 28296 8-node solid elements. The ignition point is applied at the center of the sphere. The radius of the charge is 4.07 cm. We used three planes of symmetry passing through the center. After the detonation, a high velocity shock front departs from the explosive source to the surrounding air. High explosive charge was 1 lb. (454 grams). Computation was stopped at four milliseconds after the detonation. By that time, all the significant events have taken place in the air close to the explosive.

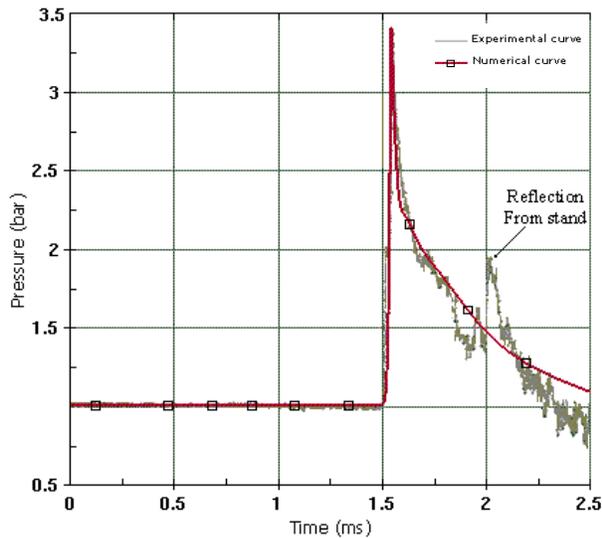


FIG. 3. Numerical and Experimental pressure history at $r=5\text{feet}$

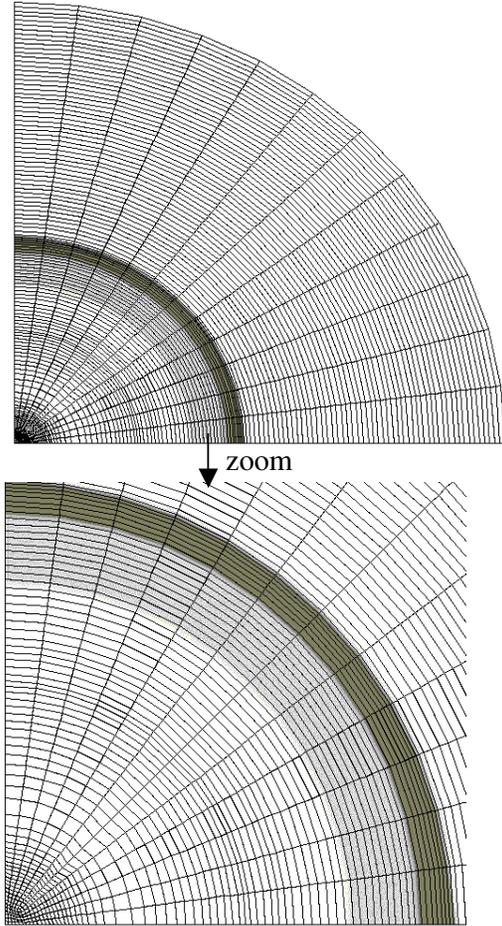


FIG. 4. Air-blast of C-4 explosive at $t=400\ \mu\text{s}$

The numerical pressure history at 5 feet (152.4cm) from the detonation center is shown in Figure 3. The curve presents a brutal increase of the pressure at $t=1500$ microseconds. An experimental pressure time history is available for this problem and it is about 3.406 bar while the numerical overpressure is about 3.405 bar when $\eta = 0.003$. So, the both graphs present analogous curve. Figure 4 shows that the mesh is refined in the region of large pressure gradients. The pressure from the relaxation method is closer to experimental data than the pressure from the classical ALE and Eulerian calculations. The curve 5 (peak according to η), shows that the value of parameter η must be included between 0.001 and 0.1.

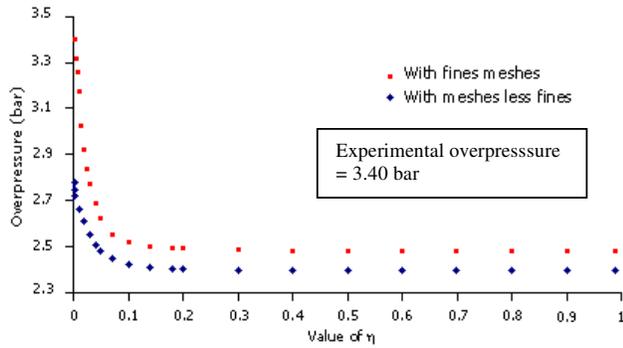


FIG. 5. Overpressure according to relaxation parameter η curve

4.3 . Three-dimensional Detonation in air in the case with reflection

In this study, a plane of blocking nodes is placed at 4 feet (121.92cm) from the static charge. We used two planes of symmetry. The ignition point is applied at the center of the sphere. The discretization of the C-4 explosive charge and fluid is one-quarter mesh composed of 132816 8-node solid elements. The radius of the charge is 3.23 cm. The explosive was modeled with 8-nodes elements. After the detonation, a high velocity shock front departs from the explosive source to the surrounding air. High explosive charge was 0.5 lb. (227 grams) of composition C-4. Computation was stopped at 6.5 milliseconds after the detonation.

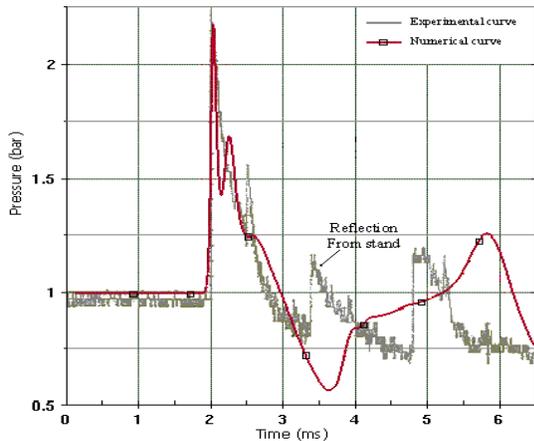


FIG. 6. Numerical and Experimental pressure history for the case with wall at $r=5$ feet

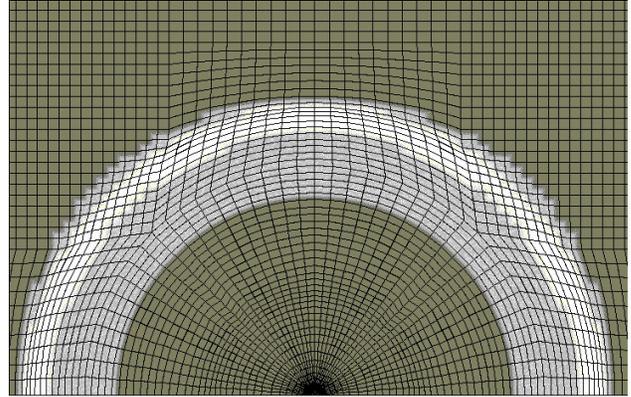


FIG. 7. Air-blast of C-4 explosive in the case of reflection at $t=800\mu s$

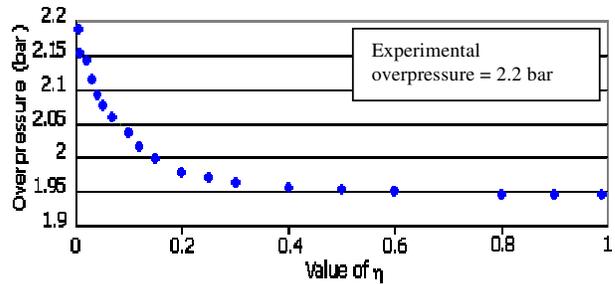


FIG. 8. Overpressure according to relaxation parameter η curve

As seen in Figure 6, Experimental results give the curve of pressure. After the first peak of pressure, a second peak due to the reflection against the wall appears. The numerical results are shown in the same figure. In this case, both peak pressures, as well as the corresponding times also are close to the experimental values. For the first peak, the numerical overpressure magnitude is 2.18 bar and while the experimental one is 2.2 bar. The moment for which the shock waves directly reaches the height of 5 feet is the same in the both case and its value is 2 ms. The first peak corresponding at the overpressure gives the result found in the previous section. The second peak of pressure reaches 1.25 bar in the numerical case and 1.2 bar in the experimental case. These results show the similarity of the both curves. Figure 7 gives the propagation of the air-blast wave at $t= 800 \mu s$. Figure 8 (overpressure according to η), confirms that the value of the relaxation parameter η must be included between 0.001 and 0.1.

Conclusion

This paper has introduced a technique for delaying the mesh relaxation in ALE applications. The new method is an efficient tool for the treatment of shock

waves. The function delaying the relaxation is simple and easily implemented in existing Finite Element codes. Delaying the mesh relaxation makes the description of motion more "Lagrange like", contracting the mesh in the vicinity of the shock front. This is beneficial for the numerical accuracy, in that dissipation errors are reduced. Away from the shock, the method relaxes the mesh to eventually behave more as an Eulerian or a classical ALE equipotential method. The definition of the relaxation parameters has improved for general applications of shock wave. The parameter η must have the smallest value, included between 0.001 and 0.1, with which the time step does not become critical.

References

- [1] Benson, D.J. , "Computational Methods in Lagrangian and Eulerian Hydrocodes", *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.* **99** (1992) 235-394.
- [2] Benson, D.J., "An Efficient, Accurate, Simple ALE Method for Nonlinear Finite Element Programs", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* **72** (1989) 309-350.
- [3] Hughes, T.J.R., Liu W.K., Zimmerman T.K., "Lagrangian-Eulerian Finite Element Formulations for Incompressible Viscous Flows," *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg* **29** (1981) 329-349.
- [4] Donea, J., "Arbitrary Lagrangian-Eulerian Finite Element Methods", *Computational Methods in Mechanics.* **10**(1) (1983) 473-516.
- [5] Souli, M., Ouahsine, A., Lewin, L. "ALE Formulation for fluid Structure Interaction Problems Methods", *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* **190** (2000) 659-675.
- [6] Young, D.L., "Time-dependent multi-material flow with large fluid distortion", *Numerical Methods for Fluids Dynamics*, Ed. K. W. Morton and M.J. Baines, Academic Press, New-York (1982).
- [7] Benson, D.J., "Momentum Advection on a Staggered Mesh", *Journal of Computational Physics*, **100**(1) (1992) 143-162.
- [8] Van Leer, B., "Towards the Ultimate Conservative Difference Scheme. IV. A New Approach to Numerical Convection", *Journal of Computational Physics*, **23** (1977) 276-299
- [9] Woodward, P.R., and Collela, P., "The numerical simulation of two-dimensional fluid flow with strong shocks", *Lawrence Livermore National Laboratory*, UCRL-86952, (1982)
- [10] Winslow, A.M., "Numerical solution of the quasilinear Poisson equation in a nonuniform triangle mesh", *J. Computational Phys. I*, **1** (1967) 149-172.
- [11] Itoh, S., Nagano, S., Hamada, T., Murata, K. and Kato, Y., "High Pressure Generation Using Underwater Explosion of Spiral Detonating Cord", *ASME PVP-Vol.* **414-2** (2000) 81-85.

High Explosive Impact Analysis using LS-DYNA

K. Mahmadi, N. Aquelet, M. Souli

Laboratoire de Mécanique de Lille, URA CNRS 1441
Université des Sciences et Technologies de Lille
59655 Villeneuve d'Ascq Cedex, France

ABSTRACT

In order to realize numerical simulation of fast transient events, some wave propagation codes, which allow studying the time resolved development of shock wave propagation due to penetration, and detonation, were developed. In this article, Eulerian Multi-material and Arbitrary Lagrangian Eulerian formulations are used. Both formulations have already been used with success in the simulation of fluid with large motion such as the tank sloshing modeling, the overdriven detonation or the simulation of metal cutting processes. This article describes an air-blast simulation using an explicit finite elements code LS-DYNA. The main aim of this investigation is to compare numerical results with experimental results in order to prove the abilities of Eulerian Multi-Material and ALE formulations to treat air-blast problem using an explicit finite element method.

1. INTRODUCTION

This article deals with the air-blast wave modeling. The jump in pressure known as a shock wave gives a peak so called overpressure. The investigations described in this article aims to model this physical phenomenon for a C4-explosion in air by using an explicit finite element code, which is used to simulate large deformation material responses and dynamic processes and to solve the continuum equations for nonlinear responses of materials and structures.

Here, the first application will be to find the bomb air-blast overpressure in infinite atmosphere in order to compare it with the experimental pressure history. The fluid in the first application is modeled by an Eulerian mesh based upon the Eulerian Multi-Material method. This method was used successfully to model many industrial and academic applications as the sloshing tank problem or the metal cutting process. An ALE formulation is used for the same application in order to compare numerical results with experimental results. By adding a plane of blocking nodes at 4 feet from the charge, the second application of the code is to simulate the shock wave reflection from a wall using an Eulerian Multi-Material formulation.

2. ALE FORMULATION

Two levels of arbitrary Lagrangian Eulerian technology exist. One allows ALE behavior only within a material (forcing material boundaries to remain Lagrangian). The second level of ALE technology allows multi-material elements to form and is therefore more generally applicable.

An ALE formulation contains both pure Lagrangian and pure Eulerian formulations. The ALE approach is based on the arbitrary movement of a reference domain, which, additionally to the common material domain and spatial domain, is introduced as a third domain. Arbitrary Lagrangian Eulerian finite element methods gain interest for the

capability to control mesh geometry independently from material geometry. The mathematical basis of the ALE and rezoning algorithms is simple, but their implementation is complicated due to the tedious geometrical calculations associated with handling an arbitrary mesh.

In the ALE description, an arbitrary referential coordinate is introduced in addition to the Lagrangian and Eulerian coordinates [14].

Balance equations are equations representing fundamental physical laws. In the mechanical domain, these include laws expressing conservation of mass, energy, and momentum. The strong form of the problem governing Newtonian fluid flow in a fixed domain consists of the governing equations and suitable initial and boundary conditions. The equations governing the fluid problem are the ALE description of the Navier-Stokes equations. Navier and Stokes described the equations for a viscous, compressible fluid [10]. The Navier-Stokes equations form a set of differential equations. In the ALE description, an arbitrary referential coordinate is introduced in addition to the Lagrangian and Eulerian coordinates. The time material derivative can be expressed in terms of both the spatial and reference coordinates.

$$\frac{\partial f(X_i, t)}{\partial t} = \frac{\partial f(x_i, t)}{\partial t} - w_i \frac{\partial f(x_i, t)}{\partial x_i} \quad (1)$$

where X_i is the Lagrangian coordinate, i the referential coordinate, x_i the Eulerian coordinate, u_i and w_i are the material and reference velocities, respectively. Let denote by v the velocity of the material and by u the velocity of the mesh. In order to simplify the equations we introduce the relative velocity $w = v - u$. Thus the governing equations for an incompressible Newtonian fluid in the ALE form are given by:

- The conservation of mass

The conservation of mass is a fundamental concept of physics along with the conservation of energy and the conservation of momentum. It gives us an easy way to determine the velocity of flow if the density is constant.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\rho \frac{\partial v}{\partial x_i} - w_i \frac{\partial \rho}{\partial x_i} \quad (2)$$

- The conservation of momentum

Momentum is simply the mass of an object multiplied by the velocity of the object. Within some problem domain, the amount of momentum remains constant. Dealing with momentum is more difficult than dealing with mass and energy because momentum is a vector quantity having both a magnitude and a direction [14]. Momentum is conserved in all three physical directions.

$$\frac{\partial v}{\partial t} = -(\sigma_{ij} + \rho b_i) - \rho w_i \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \quad (3)$$

where σ_{ij} is the stress tensor :

$$\sigma_{ij} = -p \delta_{ij} + \mu (v_{i,j} + v_{j,i}) \quad (4)$$

The last equations are solved with the boundary conditions and initial conditions.

- The conservation of energy

Energy can be converted from one form to another but the total energy within the domain remains fixed.

$$\frac{\partial E}{\partial t} = -(\sigma_{ij} v_{i,j} + \rho b_i v_j) - \rho w_j \frac{\partial E}{\partial x_j} \quad (5)$$

There are two ways to implement the ALE equations. The first way solves the fully coupled equations for computational fluid mechanics; this approach used by different authors can handle only a single material in an element. The other approach is referred to as an operator split in the literature, where the calculation, for each time step is divided into two phases. First a Lagrangian phase is performed, in which the mesh moves with the material, in this phase the changes in velocity and internal energy due to the internal and external forces are calculated. The equilibrium equations are:

$$\frac{\partial v_i}{\partial t} = \sigma_{ij} + \rho b_i \quad (6)$$

$$\frac{\partial E}{\partial t} = \sigma_{ij} v_{i,j} + \rho b_i v_i \quad (7)$$

In the second phase, the advection phase, transport of mass, internal energy and momentum across cell boundaries are computed. [9].

3. EULERIAN MULTI-MATERIAL FORMULATION

In the Eulerian method generally, the fluid movements are not related to the motions of the grid and the material flows through the mesh. The main advantage of this method is that the cells can undergo an arbitrarily large distortion without loss

of accuracy. The Lagrangian description is the approach that: the mesh moves with the material, making it easy to track surfaces and apply boundary conditions. The main problem with Lagrangian methods is that of numerical inaccuracy of highly distorted spatial meshes and the tendency for large distortions to become singular. . In the Eulerian method generally, the fluid movements are not related to the motions of the grid and the material flows through the mesh. The main advantage of this method is that the cells can undergo an arbitrarily large distortion without loss of accuracy. The Lagrangian description is the approach that: the mesh moves with the material, making it easy to track surfaces and apply boundary conditions. The main problem with Lagrangian methods is that of numerical inaccuracy of highly distorted spatial meshes and the tendency for large distortions to become singular.

The Eulerian mesh is fixed in space, thereby eliminating all the problems associated with a distorted mesh that are commonly encountered with a Lagrangian formulation. Since the material flows through the mesh, additional data is necessary to describe the current contents of an element and additional calculations must be performed to update the data. The additional calculations, which account for the material transport between the elements, are usually much more expensive than the lagrangian terms in the calculation [7].

The Eulerian Multi-Material formulation is a method where the material flows through a fixed mesh and where two or more different materials can be mixed within the same fixed mesh Then, the material boundaries are defined and each material is assigned a number. Material numbers therefore serve a function beyond distinguishing material with different properties.

Three-dimensional Multi-Material arbitrary Lagrangian Eulerian methods for unstructured grids are relatively new. The ALE Multi-Material formulation is a method allowing the finite element mesh to move independently to the material flow and where each element in the mesh can contain a mixture of two or more different materials [5]. After moving the mesh a remapping of variables to the new mesh locations is performed. Advection methods are essential for accurate remapping. The ALE Multi-Material method provides the accuracy of Lagrangian mesh motion and unstructured grids allows for more accurate representation of curved surfaces and complex geometry. The high explosive charge and the air were modeled with finite elements. Coupling an arbitrary connected grid to the ALE Multi-Material algorithm facilitates modeling of complex shapes with a minimum number of computational cells [13]. Element quantities are advected with donor cell, Van Leer, or super-B algorithms. [2,3]. In this study, element quantities are advected with the Van Leer method.

4. JONES-WILKINS-LEE EQUATION OF STATE FOR HIGH EXPLOSIVE

There have been many equations of state proposed for gaseous products of detonation, from simple

theoretically based EOS to empirically based EOS with many adjustable parameters [4]. Although these EOS approximate, the real behavior depends on the material, which is detonated. In the particular class of condensed materials known as high explosives and their products of detonation, the most common formulation is the fact that it can represent well the experiments, which are primary source for high explosive EOS data, the explosive cylinder test [4].

The material model requires density, energy density, detonation velocity, Chapman-Jouget pressure, and an equation of state to be defined in the input.

This latter pressure is defined in the framework of the Chapman-Jouget theory, which the main assumptions are a thermodynamic equilibrium of the detonation products, which is reached instantaneously, and the total consummation of explosive products. In reality, some of components of the explosive react too late to drive the detonation front and heat flows too slowly to bring all components into thermal equilibrium. Nevertheless, the Chapman-Jouget is a sufficient approach of the detonation problem.

The explosive was modeled with 8-nodes elements. Chapman-Jouget pressure generally refers to the detonation pressure. The equation of state determines the relation between the blast pressure, volume and energy. The JWL (Jones-Wilkins-Lee) equation of state was used in the following form [8]:

$$p = A \left(1 - \frac{\omega}{R_1 V} \right) \exp(-R_1 V) + B \left(1 - \frac{\omega}{R_2 \omega} \right) \exp(-R_2 V) + \frac{\omega}{V} E \quad (8)$$

In the Equation 1 p is the pressure, V is the relative volume, while A , B , C , R_1 , R_2 and ω are constants. At the beginning of the computations $V=1.0$. E_0 is the initial energy per unit volume (energy density).

The first term in the JWL equation of state is a high-pressure term. The second term is an additional term. The last term in the JWL equation of state is called: low pressure term, and can be considered lonely if A and B are null or if, more physically, the relative volume is sufficiently important so that the exponential terms vanish.

This equation of state is derived from the following adiabatic form for the pressure:

$$p_s = A \exp(-R_1 V) + B \exp(-R_2 V) + C V^{-(\omega+1)} \quad (9)$$

The subscript s denotes reference to isentropic compression or expansion. In fact, by using the both following thermodynamic identities

$$\left(\frac{\partial E}{\partial V} \right)_s = -p, \text{ the isentropic energy can be found:}$$

$$E_s = \frac{A}{R_1} \exp(-R_1 V) + \frac{B}{R_2} \exp(-R_2 V) + \frac{C}{\omega} V^{-\omega} \quad (10)$$

By using $\left(\frac{\partial E}{\partial p} \right)_V = \frac{V}{\Gamma}$ and the Taylor expansion of

pressure, we can recover the JWL equation of state (8).

For the used values in this article (see below), the physical behavior of JWL equation of state can be decomposed following the three terms included in the equation of state. In generally, the term $A \exp(-R_1 V)$ dominates in first (see figure 1) when the explosive is compressed so that its volume is smaller than its initial volume ($V < 1$). In second time, the second exponential is the largest term for $1 < V < 2$.

The last term in the JWL equation of state can be considered lonely if A and B are null or if, more physically, the relative volume is sufficiently important so that the exponential terms vanish.

$$p = \omega \frac{E_0}{V} \quad (11)$$

It is seen to be the same as the ideal gas law:

$$p = (\gamma - 1) \rho E_0^* \quad (12)$$

where :

γ : is the heat capacity ratio, ρ is the density and E_0^* is the energy per unit mass.

E_0 is the energy per unit volume.

The ideal gas law (gamma law) was used as the equation of state for air. The following numerical values were used for air:

ω	E_0 (Mbar- cm ³ / cm ³)	ρ (g / cm ³)
0.40	2.5 10 ⁻⁶	1.293 10 ⁻³

Table 1: Numerical values used for air

Then, JWL equation of state takes the form of a perfect gas equation of state. When the density becomes large, exponential terms modify the perfect gas equation of state by stiffening it. The JWL equation of state depends of relative volume only, so, the application of this equation of state is limited at isentrope cases. Since, in the present air-blast modeling, the temperature is supposed constant, the JWL equation of state can be used for the C4-explosive. The performance values for C-4 are:

A (Mbar)	5.98155
B (Mbar)	0.13750
R_1	4.5
R_2	1.5
E_0 (Mbar- cm ³ / cm ³)	0.087
ω	0.32
V_d (cm / μ s)	0.804
ρ (g / cm ³)	1.601
ρ_{CJ} (Mbar)	0.281

Table 2: Parameters used for C-4 explosive

	Time (μ s)	Relative Error(%)	Peak (bar)	Relative Error (%)
Experimental Result	1500	-	2.96	-
Numerical results with Eulerian Multi-Material formulation	1500	0	2.9	2.0
Numerical results with ALE formulation	1520	0.013	3	1.3

Table 3: Summary Table (Case without wall)

	Experimental Result	Numerical results with Eulerian Multi-Material Formulation
Time (μ s)	2000	1950
Relative Error (%)	-	2.5
First Peak (bar)	2.17	2.13
Relative Error (%)	-	1.8
Time (μ s)	5000	5100
Relative Error (%)	-	2
Second Peak (bar)	1.2	1.3
Relative Error (%)	-	8.3

Table 4: Summary Table (Case with wall)

8. CONCLUSION

Computer analysis of bomb blast inside the air was performed. Comparisons with the calculation showed good correlation. LS-DYNA code makes it possible to simulate the blast in atmosphere and the reflection of the shock on a ground. The pressure histories showed some differences between the experimental and the numerical results. In fact, Eulerian Multi-Material and ALE formulations are suited to simulate the air-blast propagation. The ability of the reflecting wave modelling based on the Multi-Material formulation to approach the experimental pressure history is demonstrated.

REFERENCES

- [1] Loikkanen M.J., Chen V.L., Souli M., Gatto J. A. "Computer simulation in the design of blast resistant structures", National Institute for Aerospace Studies and Services, Livermore Software Technology Corporation, Federal Aviation Administration, 1995.
- [2] Peery J. S., Budge K. G., Wong M. K. W., and Trucano T. G. "RHALE: A 3-D MMALE code for unstructured grids", In ASME, editor, Advanced Computational Methods for Material Modeling, AMD-Vol. 180/PVP-Vol. 268, pages 159--174, 1993.
- [3] Budge K. G., Peery J. S., «RHALE : A MMALE shock physics code written in C++", International Journal of Impact Engineering 14:1-4 (1993).

[4] Rightley M. «Equation of state for gaseous products of detonation" Los Almos National Laboratory (1998).

[5] Benson D. J., "Computational methods in Lagrangian and Eulerian Hydrocodes", Computer methods in Applied Mechanics and Engineering 99 (1992) 235-294.

[6] Fried L. E., Murphy M. J., Souers P.C., Wu B. J., Anderson S. R., McGuire E. M. and Maiden D. E., "Detonation modeling with an in-line thermochemical equation of state", presented at Eleventh International Detonation Symposium, Snowmass, CO, 1998.

[7] Benson D. J. "A Multi-Material Eulerian Formulation for the efficient solution of impact and penetration problems ", Computational Mechanics, Volume 15 Issue 6, pp 558-571 , 1995.

[8] Hallquist, J. O., 1998 " LS-DYNA, Theoretical Manual ", Livermore Software Technology Corporation, Livermore.

[9] Mair H. U. "Hydrocodes for structural response to underwater explosions", Shock and Vibration 6/2 (1999), 81-96.

[10] Olovsson L., Souli M. "Training Class in ALE and fluid-structure interaction", June 2001.

[11] Benson D. J. "Computational methods in Lagrangian and Eulerian Hydrocodes", Computational Methods in Applied Mechanics and Engineering, Vol. 99, pp. 235-394, 1992.

[12] Benson D. J. "Shock capturing methods in Hydrocodes", Department of Applied Mechanics and Engineering Sciences, University of California at San Diego, La Jolla, CA 92093.

[13] Peery J. S. , Caroll D. E. "Multi-Material ALE methods in unstructured grids", Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 187, pp. 591-619, 2000.

[14] Souli M., Ouahsine A., Lewin L. "ALE Formulation for fluid-structure interaction problems", Computer Methods in Applied Mechanics in Engineering, 190, pp. 659-675, 2000.

[15] Kury, J.W, Hornig H.C., Lee, E.L., McDonnel, J.L., Ornellas, D.L., Finger, M., Strange, F.M. and Wilkins, M. L., "Metal acceleration by chemical explosives", 4th Symposium (International) on Detonation, White Oak Maryland, October 12-25 1965, pp. 3-13.

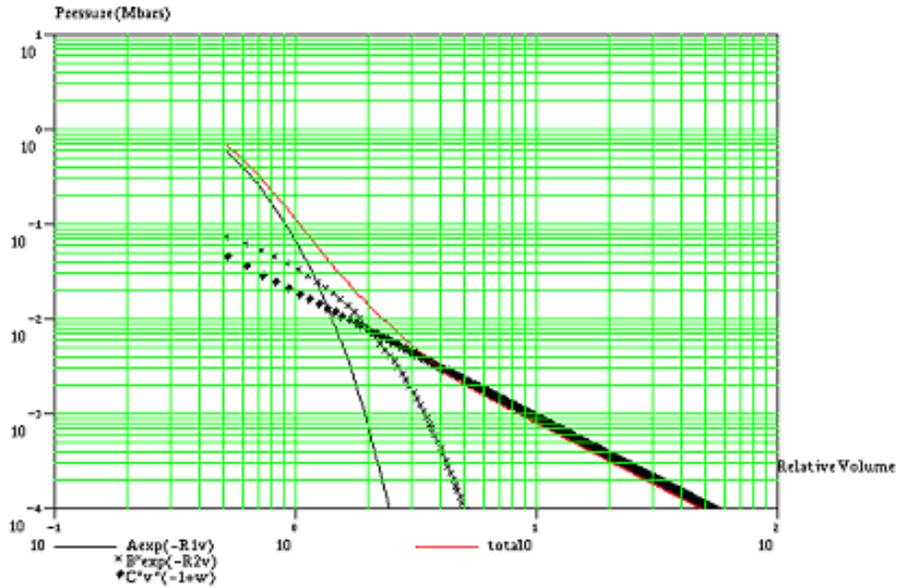


Figure 1: Components of the JWL equation of state

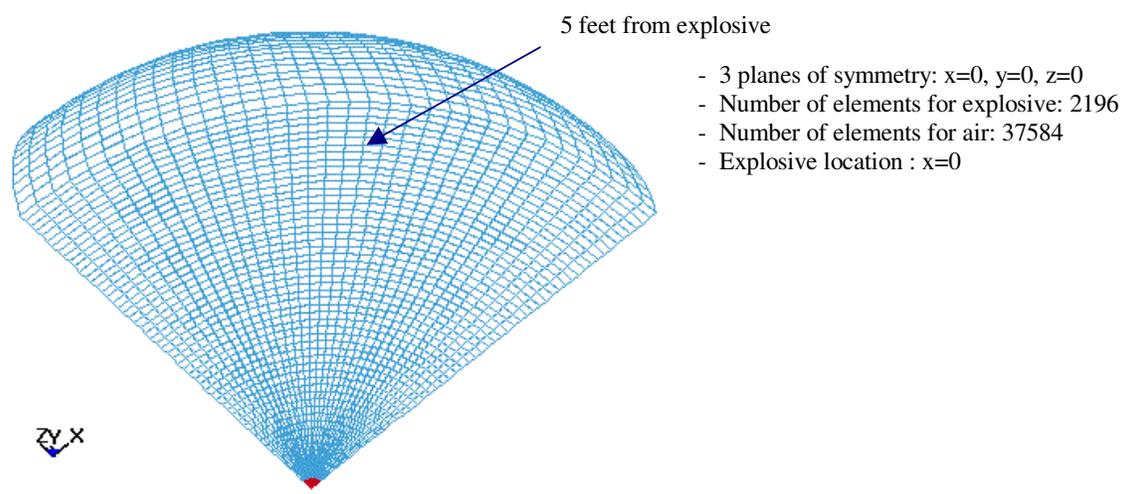


Figure 2 : 1/8 of high explosive and air mesh

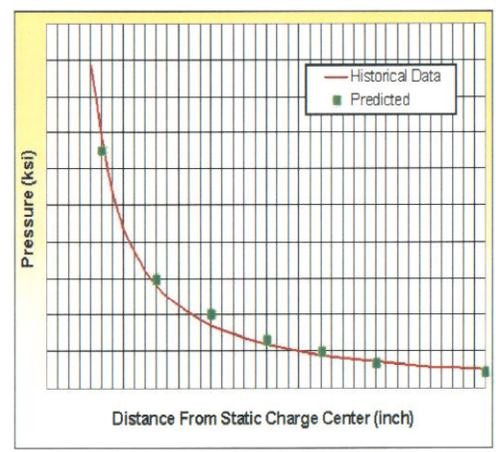
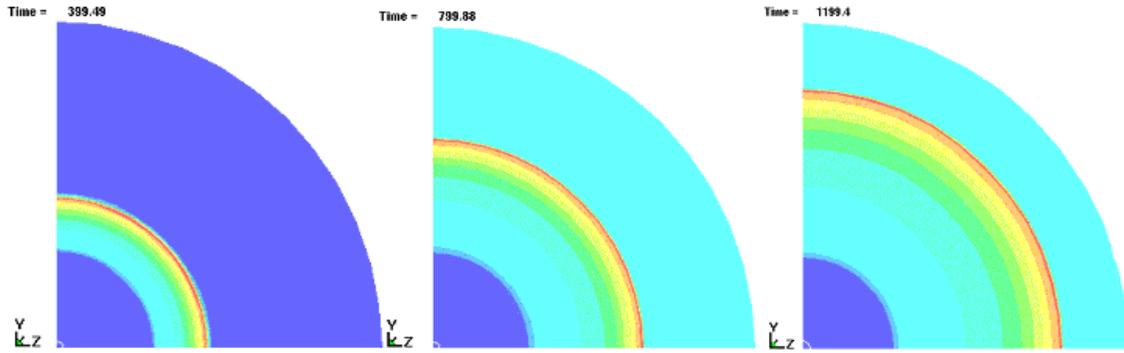


Figure 3 : Shape of the pressure peak curve in respect of the distance from the static charge



Figures 4. Explosive gas expansions with Eulerian Multi-Material formulation at $t=400\mu\text{s}$, $800\mu\text{s}$ and $1200\mu\text{s}$

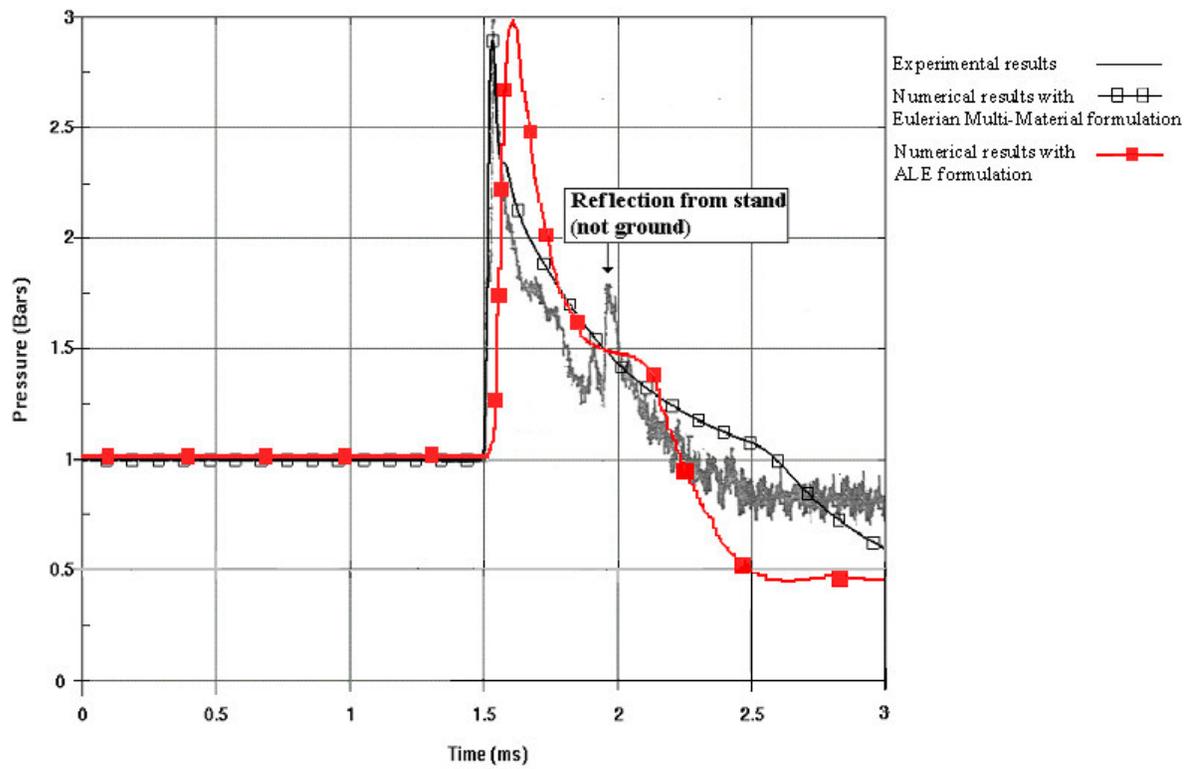
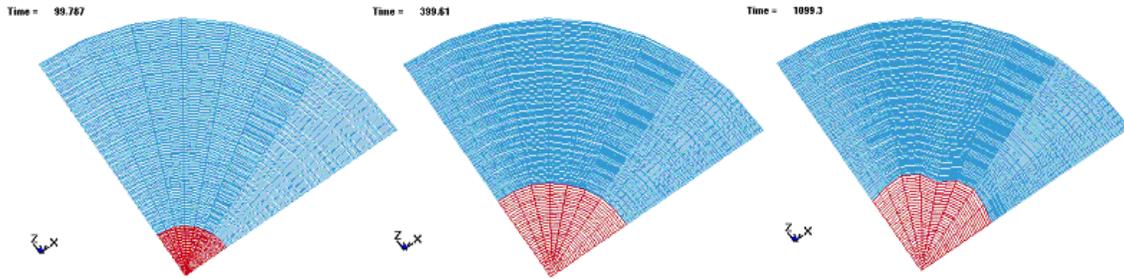
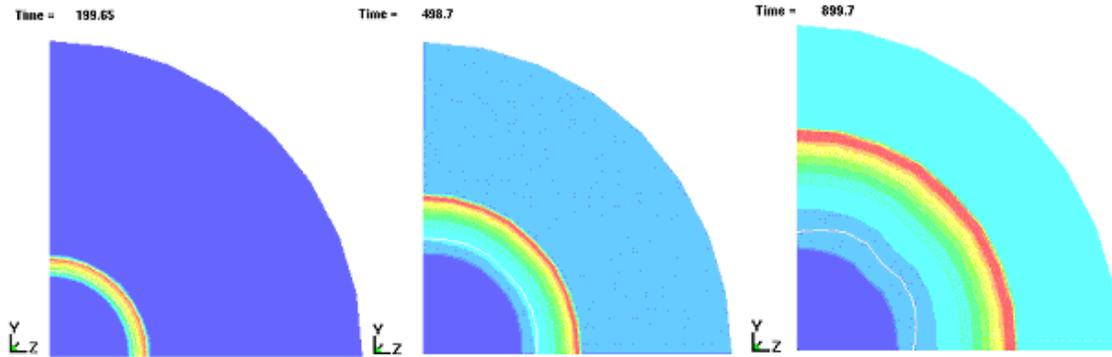


Figure 5: Experimental results from Mc Donnell DOUGLAS and Numerical results with Eulerian Multi-Material and ALE formulations



Figures 6 : Mesh at 100 μ s, 400 μ s and 1100 μ s



Figures 7: Explosive gas expansions with ALE formulation

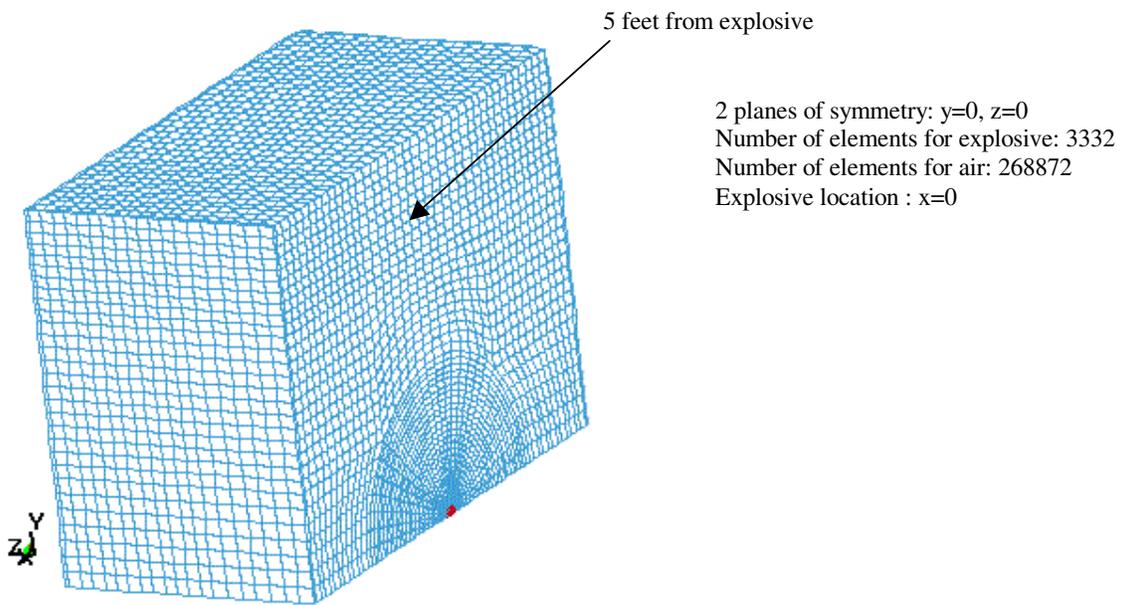


Figure 8: Quarter of high explosive and air mesh

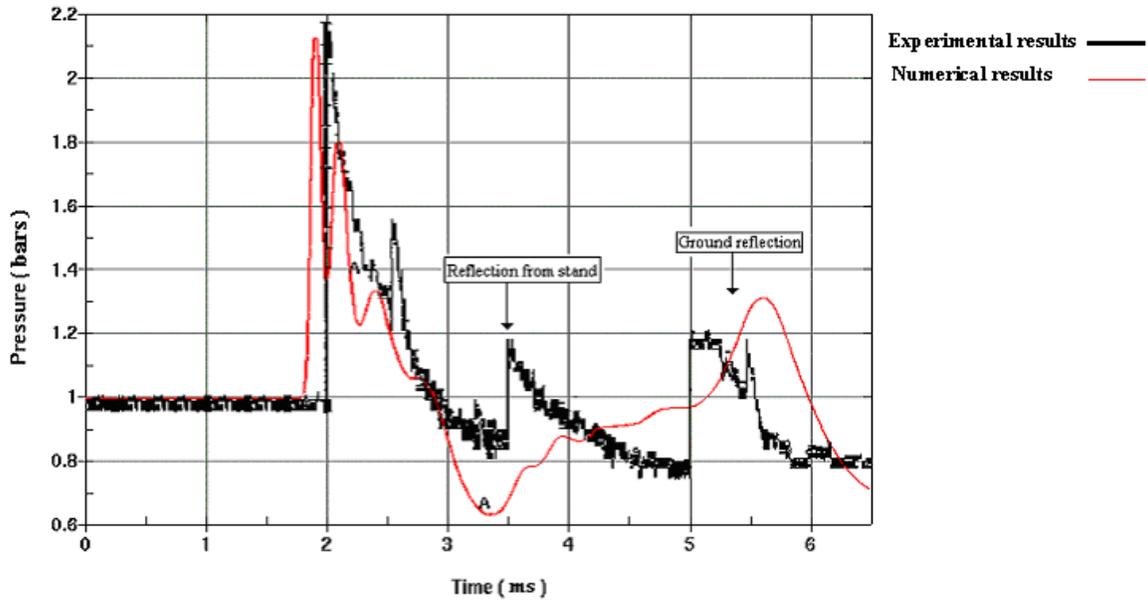


Figure 9: Experimental results from Boeing and Numerical results

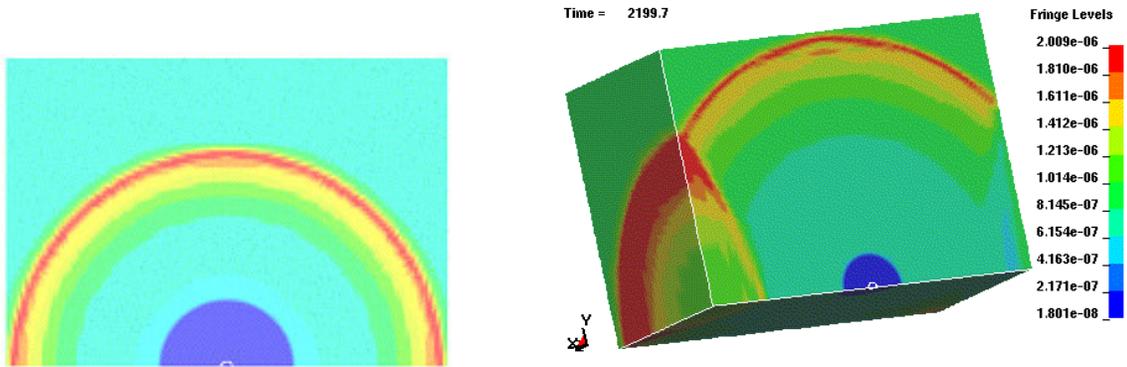


Figure 10: Air-blast before the reflection

Figure 11: Reflecting air-blast at t=2.2ms

ALE Multi-Material Formulation of High Explosive Detonation using LS-DYNA3D

K.Mahmadi , N.Aquelet , M.Souli
Laboratoire de Mécanique de Lille, URA CNRS 1441
Université des Sciences et Technologies de Lille
59655 Villeneuve d'Ascq Cedex
J.Gabrys, The Boeing Company, Philadelphia

ABSTRACT

The simulation of problems in continuum mechanics involving highly transient phenomena and large deformations such as blast, shock wave propagation and reflection presents significant challenges in computational mechanics. Several models have been developed which allow some visualization of blast propagation. In this article, the numerical tool used for the blast modeling is an Eulerian multi-material formulation. The multi-material formulation has already been used with success in the simulation of fluid with large motion such as the tank sloshing modeling or the simulation of metal cutting processes. This paper describes an air blast simulation with a multi-material Eulerian formulation implemented in an explicit finite elements code, LSDYNA3D. Experimental results give the pressure histories to a distance of 5 feet from the point of initial detonation of C4-explosive. A first purpose is to prove the ALE capabilities to correlate numerical results with the experimental results. An experimental pressure history at the same point is measured when the blast shock is reflected by a ground. The second aim of this paper is to compare the experimental pressure history and the numerical pressure history for the same point

INTRODUCTION

This article deals with the airblast wave modeling. This sharp change in air pressure is generally produced by a deflagration and propagates with a supersonic speed. The jump in pressure known as a shock wave gives a peak so called overpressure. The investigations described in this paper aims to model this physical phenomenon for a C4-explosion in air by using an explicit finite element code, LS-DYNA3D. Hydrocode LS-DYNA is used to simulate large deformation material responses and dynamic processes and to solve the continuum equations for nonlinear responses of materials and structures. In the detonation modeling case, the fluid mesh undergoes large deformations. As the LS-DYNA3D scheme is explicit, the mesh can become distorted. Then, the rezoning of ALE methods is used to create a new undistorted mesh for the fluid domain. The fluid in this article is modeled by a Eulerian mesh based upon the Eulerian multi-material method detailed in [5]. This method was used successfully to model many industrial and academic applications as the sloshing tank problem or the metal cutting process.

Here, an application of hydrocode LS-DYNA, which was developed by Livermore Technology Corporation, will be to find the bomb airblast overpressure in infinite atmosphere in order to compare with the experimental pressure history given by Boeing Company. By adding a plane of blocking nodes at 4 feet (122cm) from the charge, the second application of the code is to simulate the shock wave reflection from a wall.

A hydrocode simulation allows to understand the physical behavior of materials after the detonation. These simulations were performed in three-

dimensions to determine the code accuracy, i.e. the adequate mesh spacing, for subsequent simulations. A hydrocode analysis shows the pressures at certain locations. The results from two cases are described. The results with computer analysis will be compared with the test results.

The units for this study were :

“ centimeters “ (cm) for length, “grams” (g) for mass, “mega bars” (Mbar) for pressure. and “microseconds”(μs) for time.

Before to study the both cases of explosion airblast modeling, LS-DYNA3D code tools are presented: the non-reflecting boundaries condition, the multi-material ALE formulation and the Jones-Wilkins-Lee equation of state described in [5] and [6].

NON-REFLECTING BOUNDARIES CONDITIONS

As the computational domain is limited, transmitting condition is imposed on the mesh frontiers to prevent the reflection of the shock wave against the boundaries. This condition makes it possible to model a infinite domain by providing a complete list of boundary segments which are the faces of brick elements included in the frontier mesh. For an infinite atmosphere, the transmitting boundary, so called the silent boundary, is defined by applying a pressure to boundary elements given by:

$$P = -c\rho V \quad (1)$$

where c is the sound velocity, ρ the material density and V the normal velocity on the boundary segment.

If a shock wave with a normal velocity V reaches the boundary of a homogeneous domain with a sound velocity c and with a local density ρ , the overpressure magnitude is $c\rho V$. So, the condition (1) on the boundary provides a wave with a opposite magnitude in order to make vanish the reflection of the shock wave. This non-reflecting boundaries condition is used in the modeling of shock wave reflection. The silent boundaries permit to prevent the interference between the required reflection from the ground and the reflections from other boundaries.

MULTI-MATERIAL ALE FORMULATION

Two levels of ALE technology exist. One allows ALE behavior only within a material (forcing material boundaries to remain Lagrangian). The second level of ALE technology allows multi-material elements to form and is therefore more generally applicable.

In both cases of study, the Eulerian MULTI-MATERIAL was used. More precisely, the used mesh is fixed, thereby, the method is Eulerian.

The Eulerian mesh is fixed in space, thereby eliminating all the problems associated with a distorted mesh that are commonly encountered with a Lagrangian formulation. Since the material flows through the mesh, additional data is necessary to describe the current contents of an element and additional calculations must be performed to update the data. The additional calculations, which account for the material transport between the elements are usually much more expensive than the lagrangian terms in the calculation [7].

The multi-material Eulerian formulation is a method where the material flows through a fixed mesh and where two or more different materials can be mixed within the same fixed mesh. Then, the material boundaries are defined and each material is assigned a number. Material number therefore serve a function beyond distinguishing material with different properties.

Three-dimensional multi-material arbitrary Lagrangian Eulerian (MMALE) methods for unstructured grids are relatively new. The multi-material ALE formulation is a method allowing the finite element mesh to move independently to the material flow and where each element in the mesh can contain a mixture of two or more different materials. The MMALE method provides the accuracy of Lagrangian mesh motion and unstructured grids allows for more accurate representation of curved surfaces and complex geometries. The MMALE provides the accuracy of a Lagrangian code while allowing a calculation to proceed under very large material distortions. The high explosive charge and the air were modeled with finite elements. Coupling an arbitrary connected grid to the MMALE algorithm facilitates modeling of complex shapes with a minimum number of computational cells. Element quantities are advected with donor cell, Van Leer, or super-B algorithms.[2,3]

In this study, element quantities are advected with the Van Leer method.

EOS JWL

There have been many equations of state (EOS) proposed for gaseous products of detonation, from simple theoretically-based EOS to empirically-based EOS with many adjustable parameters. Although these EOS approximate, the real behavior depends on the material which is detonated. In the particular class of condensed materials known as high explosives and their products of detonation, the most common formulation is the fact that it can represent well the experiments which are primary source for high explosive EOS data, the explosive cylinder test [4].

The material model requires density, energy density, detonation velocity, Chapman-Jouget pressure, and an equation of state to be defined in the input.

This latter pressure is defined in the framework of the Chapman-Jouget theory which the main assumptions are a thermodynamic equilibrium of the detonation products which is reached instantaneously and the total consumption of explosive products. In reality, some of components of the explosive react too late to drive the detonation front and heat flows too slowly to bring all components into thermal equilibrium. Nevertheless, the Chapman-Jouget is a sufficient approach of the detonation problem.

The explosive was modeled with 8-nodes elements. Chapman-Jouget pressure generally refers to the detonation pressure. The equation of state determines the relation between the blast pressure, volume and energy. The JWL (Jones-Wilkins-Lee) equation of state was used in the following form[1]:

$$p = A \left(1 - \frac{\omega}{R_1 V} \right) \exp(-R_1 V) + B \left(1 - \frac{\omega}{R_2 \omega} \right) \exp(-R_2 V) + \frac{\omega}{V} E \quad (2)$$

In the Equation 1 p is the pressure, V is the relative volume, while A , B , C , R_1 , R_2 and ω are constants. At the beginning of the computations $V=1.0$. E_0 is the initial energy per unit volume (energy density).

The first term in the JWL equation of state is a high pressure term. The second term is an additional term.

The last term in the JWL equation of state is called: low pressure term, and can be considered lonely if A and B are null or if ω is more physically, the relative volume is sufficiently important so that the exponential terms vanish.

This equation of state is derived from the following adiabatic form for the pressure:

$$p_s = A \exp(-R_1 V) + B \exp(-R_2 V) + C V^{-(\omega+1)} \quad (3)$$

The subscript *s* denotes reference to isentropic compression or expansion. In fact, by using the both following thermodynamic identities $\left(\frac{\partial E}{\partial V}\right)_s = -p$, the isentropic energy can be found:

$$E_s = \frac{A}{R_1} \exp(-R_1 V) + \frac{B}{R_2} \exp(-R_2 V) + \frac{C}{\omega} V^{-\omega} \quad (4)$$

By using $\left(\frac{\partial E}{\partial p}\right)_V = \frac{V}{\Gamma}$ and the Taylor expansion of pressure, we can recover the JWL equation of state (2).

For the used values in this article (see below), the physical behavior of JWL equation of state can be decomposed following the three terms included in the equation of state. In generally, the term $A \exp(-R_1 V)$ dominates in first (see Fig.1) when the explosive is compressed so that its volume is smaller than its initial volume ($V < 1$). In second time, the second exponential is the largest term for $1 < V < 2$.

The last term in the JWL equation of state can be considered lonely if *A* and *B* are null or if, more physically, the relative volume is sufficiently important so that the exponential terms vanish.

$$p = \omega \frac{E_0}{V} \quad (5)$$

It is seen to be the same as the ideal gas law :

$$p = (\gamma - 1) \rho E_0^* \quad (6)$$

where :

γ : is the heat capacity ratio, ρ is the density and E_0^* is the energy per unit mass.

E_0 is the energy per unit volume.

The following numerical values were used for air :

$\omega = 0.40$ (constant)

$E_0 = 2.5 \cdot 10^{-6}$ Mbar \cdot cm³ / cm³ (energy density)

$\rho = 1.293 \cdot 10^{-3}$ g / cm³ (mass density)

Then, JWL equation of state takes the form of a perfect gas equation of state. When the density becomes large, exponential terms modify the perfect gas equation of state by stiffening it. The JWL equation of state depend of relative volume only, so, the application of this equation of state is limited at isentrope cases. Since, in the present airblast modeling, the temperature is supposed constant, the JWL equation of state can be used for the C4-explosive. The performance values for C-4 are :

$A = 5.98155$ Mbar

$B = 0.13750$ Mbar

$R_1 = 4.5$

$R_2 = 1.5$

$E_0 = 0.087$ Mbar \cdot cm³ / cm³

$\omega = 0.32$

$V_d = 0.804$ cm / μ s (detonation velocity)

$\rho = 1.601$ g / cm³

$\rho_{CJ} = 0.281$ Mbar (Chapman–Jouget-Pressure)

The determination of these parameters may be derived from the isentropes calculated by thermodynamic equilibrium codes like BKW, IdeX or CHEETAH. By using the equation (3), the constant *C* can be determined by considering at the detonation beginning $V=1$ and $E_s = E_0$.

The ideal gas law (gamma law) was used as the equation of state for air.

In the following section, the airblast propagation modeling and the shock wave reflection modeling are considered.

BLAST MODELING

WITHOUT WALL

*** DESCRIPTION**

In the explicit time integration, the time step length is determined by the smallest element size in the model. The high explosive material studies was C-4 and was assumed to have a spherical shape. It was modeled with 8-node continuum elements. The ignition point was placed at the center of the sphere. The radius of the charge is 4.07 cm.

After the detonation, a high velocity shock front departs from the explosive source to the surrounding air.

High explosive charge was 1 lb. (454 grams) of composition C-4. The energy yield is 0.0876 Mbar \cdot cm³ / cm³. In this case, any plane of blocking node is placed, and so no reflecting of wave is possible. Computation was stopped at four milliseconds after the detonation. By that time, all the significant events have taken place in the air close to the explosive.

In this study, the pressure which interest us is located at 5 ft from the explosive. Figure 4 shows the predicted response of the pressure from 0 to 4 milliseconds at 5 feet (152.4 cm) from high explosive material.

The modeling was realized as shown in Fig. 2.

- 3 planes of symmetry : $x=0, y=0, z=0$
- Number of elements for explosive: 2196
- Number of elements for air: 37584
- Explosive location : $x=0$

1/8 of the charge model is shown in Fig. 3. It is surrounded with the air mesh such that there is a one-to-one node match at the boundary between the explosive model and the air models. The small elements in Fig. 2 are explosive material and the long radially extending elements are air.

After the detonation, a high velocity shock front departs from the explosive source to the surrounding air. A shock is a narrow discontinuity in the pressure wave, and therefore would require fine mesh resolution in order to capture a reasonably accurate shock peak pressure.

Close to the explosive, the element pattern in the air mesh is spherical to match the shock pressure wave emanating from the spherical charge.

*** RESULTS**

Fig.4 shows the curve of the pressure at 5 ft (152.4cm) from the high explosive material. The curve presents a brutal increase of the pressure at $t=1500$ microseconds. It is about 3 bars. This pressure with the results of the numerical simulation by LS-DYNA code is about 2.9 bars.

So, the both graphs present analogous curve. The numerical magnitude of the overpressure is close to the experimental one. In the following, the overpressure propagation is compared to the experiment data giving the pressure in respect of the distance from the charge.

*** PRESSURE PEAK IN RESPECT OF THE DISTANCE FROM THE C-4 EXPLOSIVE CENTRE**

Shock wave propagation simulation is a sufficiently accurate approach of a physical explosive airblast. Now, in the following section, the shock wave is reflected by a wall. As previously, the reflection modeling results can be compared with experiment data.

WITH WALL

*** DESCRIPTION**

There, another case was treated : the case with wall. The radius of the charge is 3.23cm. High explosive charge was 0.5 lb. (227 grams) of composition C-4. A plane of blocking nodes is placed at 4 feet (121.92cm) from the static charge. The explosive was modeled with 8-nodes elements. The purpose is to simulate the shock wave reflection from a wall.

In this case, a quarter of sphere for the explosive and air were taken.

1/4 of the charge model is shown in Fig.6. It is surrounded with the air mesh.

2 planes of symmetry : $y=0$, $z=0$

Number of elements for explosive : 3332

Number of elements for air : 268872

Explosive location : $x=0$

*** RESULTS**

Figure 8 and 9 show the propagation and the reflection of the airblast wave against the wall. This shock wave is followed by the expansion of gas produced by explosive. On the Fig.10, the distinction between the explosive gas and air for an expansion at $t=2$ ms is due to the Eulerian multi-material algorithm which allows to make visible

and to follow the interface between the explosive and air.

As seen in Fig.7, experimental results show the curve of pressure. After the first peak of pressure, a second peak due to the reflection against the wall appears. The numerical results are shown in Fig.9.

In this case, both peak pressures, as well as the corresponding times also are close to the experimental values. For the first peak, the numerical overpressure magnitude is 2.13bars and while the experimental one is 2.19bars. The moment for which the shock waves directly reaches the height of 5 feet is the same in the both case and its value is 2ms. The first peak corresponding at the overpressure gives the result found in the previous section. The second peak of pressure reaches 1.31bars in the numerical case and 1.19bars in the experimental case. In the simulation, the wave reflected by the wall passes after the first shock wave at 5.3ms while the experimental curve shows that the moment for which the reflecting shock wave passes at 5 feet is 5ms. These results shows the similarity of the both curves.

CONCLUSIONS

Computer analysis of bomb blast inside the air was performed. Comparisons with the calculation showed good correlation. LS-DYNA3D code makes it possible to simulate the blast in atmosphere and the reflection of the shock on a ground. The pressure histories showed some differences between the experimental and the numerical results. In fact, the Euler multi-material formulation is suited to simulate the air blast propagation. The ability of the reflecting wave modelling based on the multi-material formulation to approach the experimental pressure history is demonstrated. Nevertheless, the study is ongoing in order to develop a scheme more accurate to calculate the pressure. Actually, the pressure is determined by a explicit scheme. Future investigations should make it possible to improve the pressure history determination. Implementing an implicit program to calculate the pressure could be an interesting option because the local stress analysis remains problematic.

REFERENCES

- [1] Loikkanen M.J., Chen V.L., Souli M., Gatto J.A. "COMPUTER SIMULATION IN THE DESIGN OF BLAST RESISTANT STRUCTURES" National Institute for Aerospace Studies and Services, Livermore Software Technology Corporation, Federal Aviation Administration, 1995.
- [2] James S. Peery, Kent G. Budge, Michael K.W. Wong, and Tim G. Trucano "RHALE : A 3-D MMALE CODE FOR UNSTRUCTURED GRIDS" Sandia National Laboratories, Computational Physics Research and Development Department.

[3] James S. Peery, Kent G. Budge "RHALE : A MMALE SHOCK PHYSICS CODE FOR ARBITRARY MESHES" Sandia National Laboratories

EFFICIENT SOLUTION OF IMPACT IMPACT AND PENETRATION PROBLEMS"

[4] Maria Rightley "EQUATION OF STATE FOR GASEOUS PRODUCTS OF DETONATION" Los Alamos National Laboratory.

[8] LS-DYNA Keyword User's Manual Version 950, Livermore Software Technology Corporation (LSTC), Livermore (USA), May 1999

[5] D.J.Benson, "COMPUTATIONAL METHODS IN LAGRANGIAN AND EULERIAN HYDROCODES", Computer methods in Applied Mechanics and Engineering 99 (1992) 235-294

[9] M.Souli,A.Ouahsine and L.Lewin "ALE FORMULATION FOR FLUID-STRUCTURE INTERACTION PROBLEMS"

[6] L.E.Fried, M.J.Murphy, P.C.Souers, B.J.Wu, S.R.Anderson, E.M.McGuire and D.E.Maiden, DETONATION MODELING WITH AN IN-LINE THERMOCHEMICAL EQUATION OF STATE, Energetic Materials center Lawrence Livermore National Laboratory, CA 94550

[7] Benson, D.J. "A MULTI-MATERIAL EULERIAN FORMULATION FOR THE

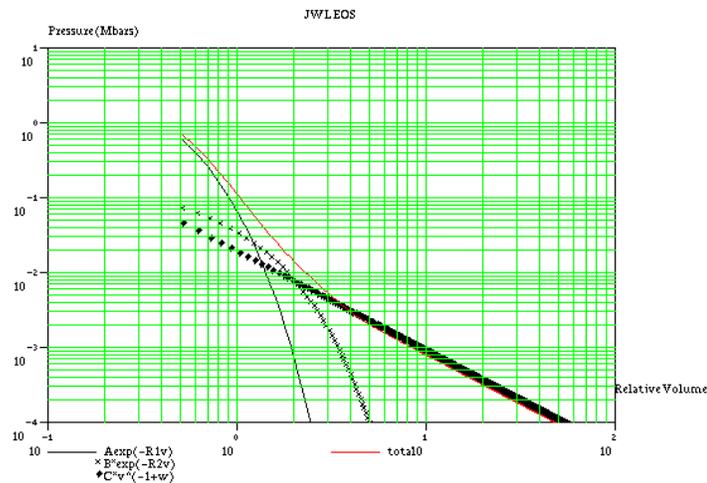


Fig.1:Components of the JWL equation of state

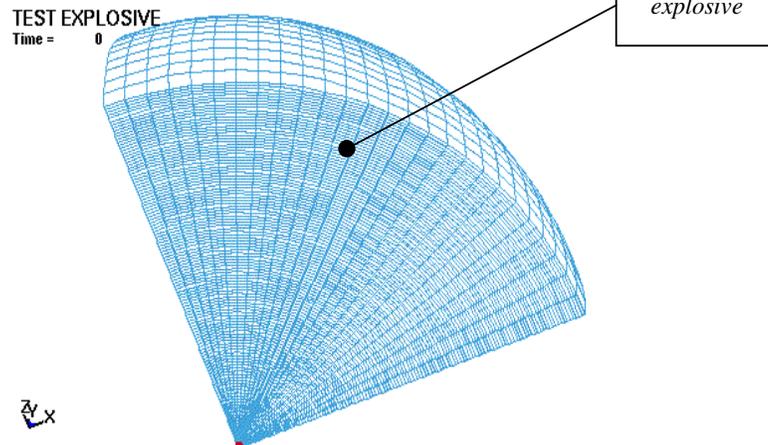


Fig. 2 : 1/8 of high explosive and air mesh

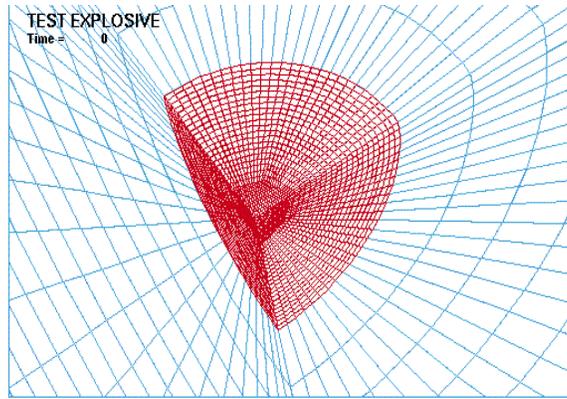


Fig.3:High explosive mesh

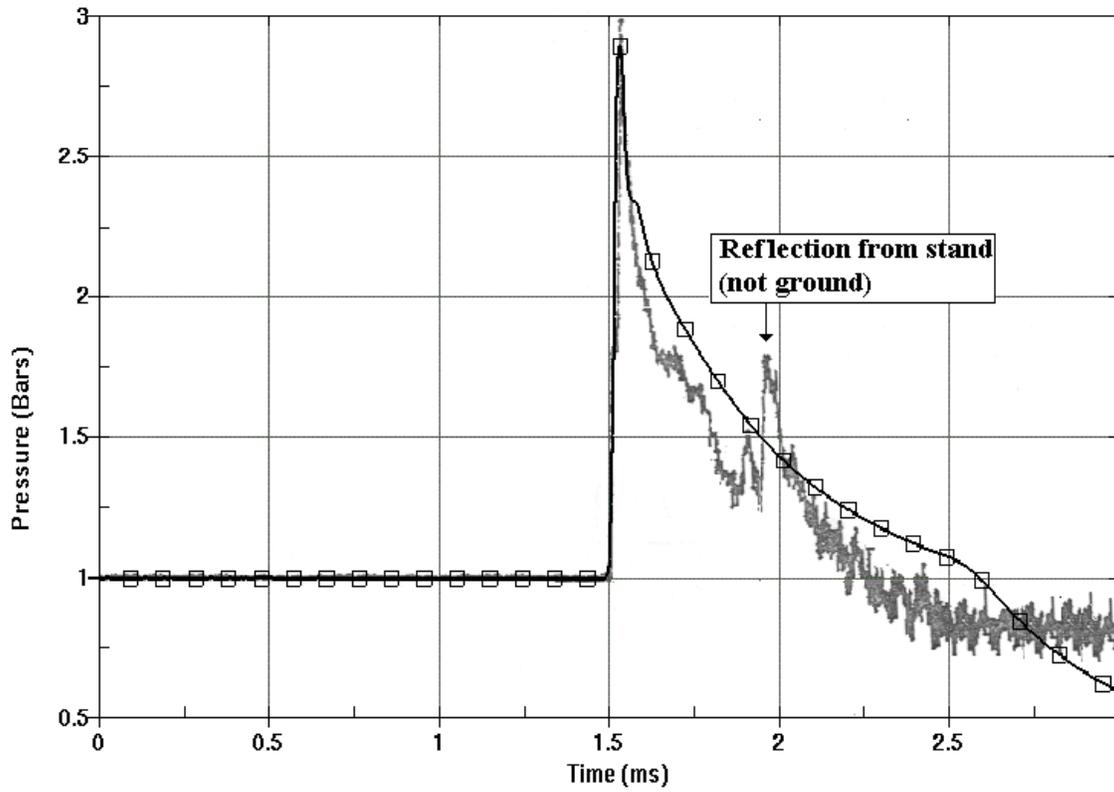


Fig.4: Experimental results from MC DONNELL DOUGLAS and Numerical results, Simulations pressure time-history at r= 5 ft.

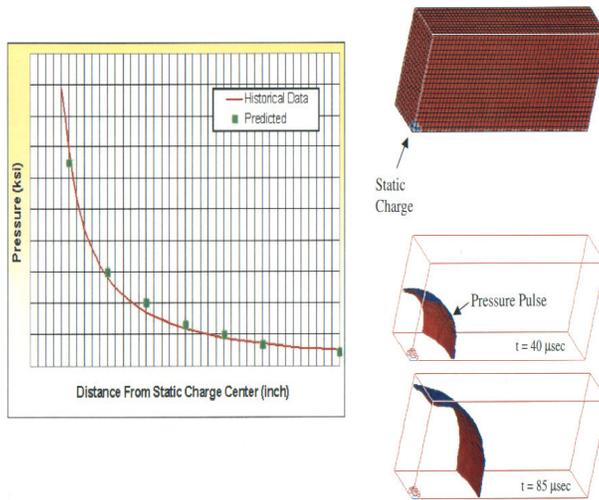


Fig.5 : Shape of the pressure peak curve in respect of the distance from the static charge.

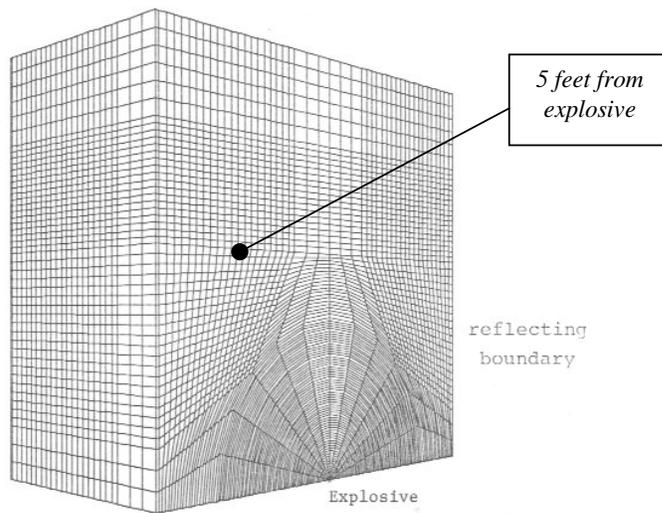


Fig.6: Quarter of high explosive and air mesh

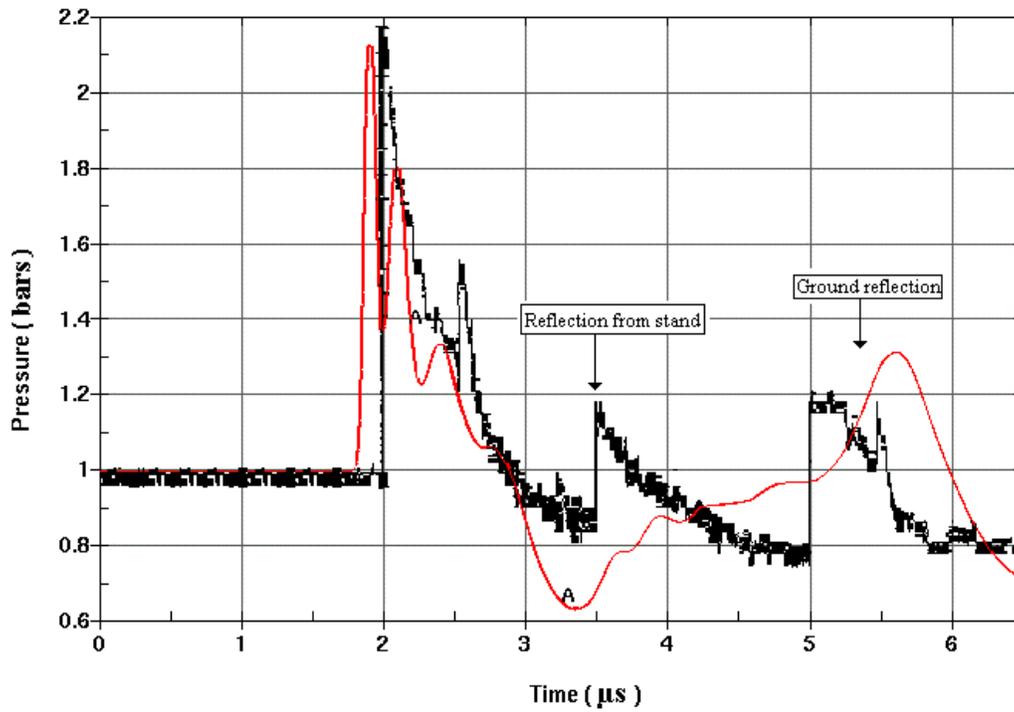


Fig.7: Experimental results from Boeing and Numerical results, Simulations pressure time-history at r=5 ft

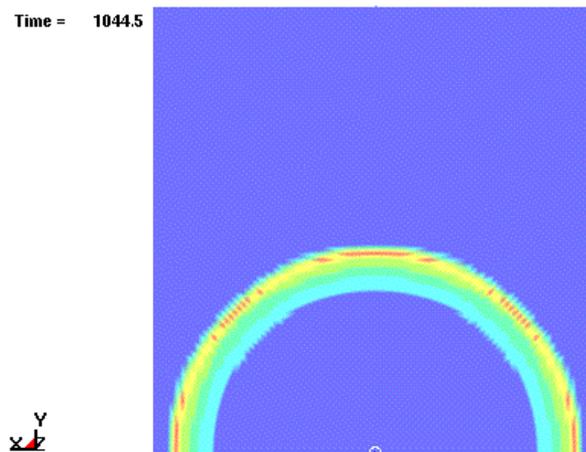


Fig.8: Airblast before the reflection at t=1ms

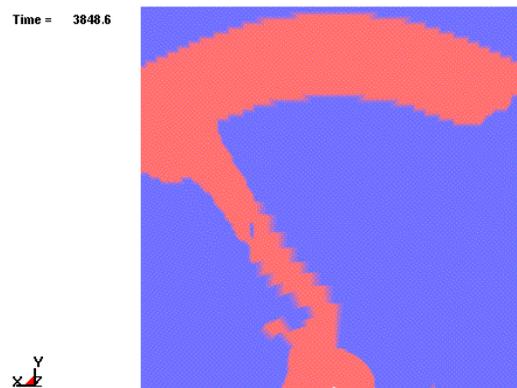


Fig.9: Reflecting airblast at t=3.8ms

Time = 2096.4

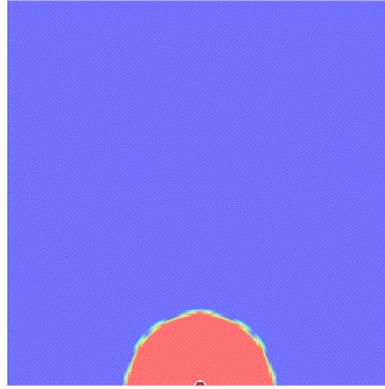


Fig.10: Explosive gas expansion at t=2ms

Résumé

La simulation des problèmes transitoires de grandes déformations telle que la détonation est primordiale pour les calculs mécaniques parce que l'approche expérimentale de ces phénomènes est souvent chère et consommatrice de temps.

Dans cette thèse, des modélisations de différents phénomènes de détonation en utilisant LS-DYNA, et une étude comparative avec les résultats expérimentaux ont été réalisées.

Au début, la méthode Lagrangienne a été utilisée pour modéliser une détonation (sans mur) de l'explosif C-4 dans l'air. Cette méthode n'est pas adaptée à des problèmes de détonation à cause des grandes déformations des matériaux.

La méthode Eulérienne multi-matériaux a donné des résultats très satisfaisants pour la détonation (sans et avec mur) de l'explosif C-4 dans l'air, et la détonation dans l'eau du cordeau détonant en forme de droite, cercle et spirale.

Les résultats obtenus par l'application de la méthode ALE multi-matériaux à la détonation (sans mur) de l'explosif C-4 dans l'air sont satisfaisants. Cependant, cette méthode ne permet pas de maintenir un maillage fin à proximité du front de choc. La méthode de relaxation retardée des mailles introduite dans la méthode ALE multi-matériaux est testée. Cette technique permet de maintenir un comportement presque Lagrangien à proximité du front de choc. Cette méthode est très convenable pour la détonation (sans et avec mur) de l'explosif C-4 dans l'air. Les résultats numériques ont été comparés aux résultats expérimentaux afin de mieux comprendre comment choisir la valeur du paramètre de relaxation.

D'autre part, un phénomène de détonation forte, qui permet de donner à un explosif (PBX) des pressions plus élevées que la pression de Chapman-Jouguet, a été modélisé en utilisant un couplage en pénalité. Une bonne corrélation a été obtenue entre les résultats numériques et expérimentaux.

Mots clés

Modélisation des détonations, ondes explosives, détonation forte, explosions, méthode Eulérienne multi-matériaux, méthode ALE multi-matériaux, relaxation retardée des mailles.

Abstract

The simulation of problems involving highly transient phenomena and large deformations such as blast presents significant challenges in computational mechanics because the experimental approach of the fast transient events is expensive and time-consuming.

In this thesis, modeling of various phenomena of detonation by using LS-DYNA, and a comparative study with the experimental results were carried out.

First, Lagrangian method was used to modeling C-4 explosive air-blast (without wall). This method is not adapted to detonation problems because of the large deformations of materials.

The results using multi-material Eulerian method are very satisfactory in the case of the C-4 explosive air-blast (without and with wall), and the case of the underwater explosion of detonating cord in various shapes (straight, circle and spiral).

The results using multi-material ALE formulation are satisfactory in the case of the C-4 explosive air-blast (without wall). However, this method will not allow to maintain a fine mesh in the vicinity of the shock wave. A delayed mesh relaxation method for multi-material ALE method was tested. This technique allows to keep a behavior as "Lagrange like" as possible in the vicinity of shock fronts. This method is very suitable for the C-4 explosive air-blast (without and with wall). The numerical results were compared to the experimental results in order to improve to understand how the relaxation parameter is chosen.

On the other hand, overdriven detonation phenomenon, which brings out higher detonation pressures than Chapman -Jouguet pressure of PBX explosive is modeled by a penalty coupling. A good correlation was obtained between numerical and experimental results.

Keywords

Modeling of detonations, explosive waves, overdriven detonation, explosions, multi-material Eulerian method, multi-material ALE method, delayed mesh relaxation.