

La détonation : chronologie des travaux de modélisation dans les explosifs condensés

Gérard Baudin
CEA/Gramat



Introduction

Cette communication relate l'historique des travaux de modélisation de la détonation dans les explosifs condensés. Les premiers travaux qui précèdent cette théorie seront présentés brièvement dans une première partie intitulée « Genèse de la théorie Chapman-Jouguet », ainsi qu'un état des lieux des diverses modélisations proposées depuis 1984. Les trois parties suivantes passent en revue les trois lignées de modèles identifiées à partir de l'étude chronologique de la modélisation de la détonation. Une conclusion rassemble les grandes avancées techniques de 1984 jusqu'en 2009, ainsi que les problèmes subsistants.

Cette étude chronologique est représentée schématiquement sous forme d'un « histovision » (terme emprunté à deux historiens C. et M. Ducourtil) représenté dans le tableau 1, à la fin de ce document. Il comporte six colonnes représentant successivement les années, les périodes historiques d'après la dénomination actuelle, les découvertes des principales substances explosives, les travaux de modélisation, les motivations de ces travaux, ainsi que les moyens de calcul disponibles.

1. Genèse de la théorie « Chapman-Jouguet »

La découverte des premières substances explosives^{1,2} remonte aux 15^{ème} – 17^{ème} siècles, avec les fulminates d'or, d'argent et de mercure mis au point par des alchimistes. L'or explosif (ou fulminate d'or) aurait été découvert par l'alchimiste B. Valentius en préparant un sudatif. L'existence de B. Valentius est parfois contestée ; il est cependant certain que l'or explosif a été redécouvert au 17^{ème} siècle par C. Van Drebbel, un sous-marinier hollandais installé en Angleterre (il a expérimenté le premier sous-marin à quelques mètres sous la surface de la Tamise). Il a également découvert les fulminates d'argent et de mercure en 1630. Entre 1604 et 1666, J.R. Glauber découvre le nitrate d'ammonium et le chlorate de potassium. Dès leurs découvertes, les premières investigations mirent en exergue des explosions d'une vivacité incomparable à celle de la poudre noire. Les dénominations « explosif brisant », « détonation », « déflagration » dateraient de cette époque, mais ne reposent pas sur des faits établis de façon scientifique.

En 1833, la découverte de la nitrocellulose par H. Braconnot marque le début d'une nouvelle époque où la nitration va se développer avec notamment la synthèse de la nitroglycérine (NG) en 1846 par A. Sobrero et l'invention du coton-poudre en 1847 par Schonbein. La NG ne sera industrialisée que 17 ans plus tard par A. B. Nobel, à cause de plusieurs accidents survenant dans cette période dont celui de 1864 au cours duquel le plus jeune des frères d'A. B. Nobel trouva la mort ainsi que quatre autres personnes. Trois années plus tard, A. Nobel invente la dynamite Kieselguhr (DyK). Citons également quatre autres dates importantes : 1872 - découverte du nitrométhane (NM) par V. Meyer et O. Stuber, 1863 – découverte du trinitrotoluène (TNT) par J. Wilbrand, 1891 – découverte de la pentrite (PETN) par Tollens et Wigand et 1899 – découverte de

l'hexogène (RDX). La première synthèse du triaminotrinitrobenzène (TATB) date de 1888, puis sera oubliée, avant d'être redécouverte dans la seconde moitié du 20^{ème} siècle à une date difficile à situer. Il en sera de même pour l'oxynitrotriazole (ONTA) qui a été synthétisé pour la première fois en 1911, puis redécouvert 60 années plus tard par la Société Nationale des Poudre et Explosifs (SNPE), en France, et le Los Alamos National Laboratory (LANL), aux Etats Unis d'Amérique. L'octogène a été découvert plus tardivement, en 1940 par W.E. Bachmann. Enfin, la molécule explosive la plus puissante, le CL20 a été découverte par Nielsen en 1987.

Si les explosifs étaient connus depuis au moins le 17^{ème} siècle, il a fallu attendre la seconde moitié du 19^{ème} siècle pour voir apparaître les premières théories. Dans les faits, l'utilisation industrielle des explosifs et leur étude n'ont été rendues possible qu'à partir de 1864 et 1867, dates de l'invention du premier inflammateur à base de poudre noire et de fulminate de mercure et du détonateur fulminate de mercure par A. Nobel. Ces deux dates marquent le début des travaux visant à identifier et comprendre les phénomènes explosifs avec F.A. Abel en 1869 et M. Berthelot en 1870. Les principales motivations étaient l'utilisation des explosifs condensés dans le domaine du génie civil.

Ce sont les travaux de F.A. Abel³ (1869) qui aboutissent les premiers à une discrimination rationnelle entre la « déflagration » (explosion du second ordre, selon les termes de l'époque) et la « détonation » (explosion du premier ordre), en étudiant les régimes d'explosion obtenus dans des charges non confinées en coton-poudre, nitroglycérine, dynamite et fulminate de mercure amorcées par un détonateur de Nobel ou par chauffage (flamme ou fil chaud). Il met ainsi en évidence l'importance d'un « effet mécanique » pour amorcer la détonation, ce qui l'amène à proposer un mécanisme de transmission de la détonation via des « vibrations synchrones ». M. Berthelot⁴ (1870), lui aussi, entrevoit le rôle d'un « effet mécanique » pour expliquer la propagation de la détonation, par un mécanisme de combustion couche par couche. Ce n'est qu'à partir de 1873 que la discrimination entre la « détonation » et la « déflagration » sera définitivement acceptée par la communauté scientifique, suite aux travaux méthodiques de L.P. Roux et E. Sarrau⁵ mettant également en évidence ces deux régimes d'explosion en étudiant les effets de la dynamite. Ils montrent que les effets obtenus sur un milieu connexe ne sont pas uniquement dus à la masse et à la nature de l'explosif, mais aussi au mode d'amorçage et à leur confinement.

Une suite de plusieurs catastrophes minières particulièrement meurtrières va susciter des travaux systématiques de compréhension des mécanismes d'explosion dans les gaz et les suspensions. La commission française du Grisou a été créée en 1877 et l'objectif fixé est la recherche de moyens propres à prévenir les explosions de grisous dans les mines de charbon.

C'est alors que les premières mesures de la vitesse de détonation en explosifs condensés (coton-poudre, DyK, NG) sont réalisées en Angleterre par F.A. Abel⁶ (1873-74), puis en France, à partir de 1879, par les membres de la Commission des Substances Explosives présidées par M. Berthelot⁷. Viennent ensuite les expériences de propagation des explosions en milieux gazeux réalisées par M. Berthelot et P. Vieille^{8,9} (1981-1982), et E. Mallard et M. Le Chatelier^{10,11} (1881-1883). Ces travaux aboutissent à l'existence de la détonation dans plusieurs mélanges gazeux fuel-oxydant dilués par de l'azote.

Que ce soit pour les explosifs condensés ou gazeux, les dispositifs utilisés sont tubulaires et de grande longueur pour obtenir une mesure fiable de la vitesse de propagation avec les moyens de l'époque : le chronographe de A. Noble développé initialement pour mesurer la vitesse des projectiles dans les canons, le chronographe de Schulze-Deprez dérivé de celui de Schulze mis au point en 1864, puis le chronographe de Le Boulengé. Le lecteur trouvera une description détaillée de ces chronographes dans l'article « Contribution de Paul Vieille à la connaissance des détonations et des ondes de choc » de N. Manson¹². Les mesures effectuées par les membres de la Commission des Substances Explosives complètent celles de M. Abel, ainsi que celles des Officiers du Génie Autrichien, citées par M. Berthelot. Nous ne sommes pas parvenus à obtenir les documents de ces officiers autrichiens.

En 1882¹³, Berthelot compare la vitesse de détonation D à la vitesse de translation moyenne des molécules formant les produits de détonation et à celle du son dans ces derniers. Ces deux dernières sont voisines et évaluées au moyen de l'expression de Clausius $c = 29.35 \sqrt{\frac{T}{\rho^*}}$ où ρ^* représente la densité des produits par rapport à l'air et T leur température calculée en admettant que leur nombre de moles et leur chaleur spécifique à pression constante sont constants ($T = Q/6.8n$). Il aboutit au résultat que la vitesse de détonation est inférieure de 5 à 12% à c . Cette analyse suscitera une polémique sur l'utilisation d'une capacité calorifique à pression constante ou à volume constant. D'autres expériences réalisées par M. Berthelot, lui-même, sur du nitrate de méthyle¹⁴ limiteront la portée de cette première théorie.

La découverte de la détonation dans les gaz, d'une part par M. Berthelot et P. Vieille, d'autre part par E. Mallard et M. Le Chatelier, parachève les travaux de F.A. Abel, de L.P. Roux et d'E. Sarrau dans les milieux condensés, sur l'existence de deux mécanismes fondamentaux de la propagation de réactions chimiques au sein de matières explosives. En France, M. Berthelot, P. Vieille et M. Le Chatelier poursuivent leurs investigations expérimentales et théoriques jusqu'en 1901. En Angleterre, H. Dixon (1893) confirme les premiers travaux de M. Berthelot, P. Vieille, E. Mallard et M. Le Chatelier, puis les complète par des mesures dans d'autres milieux gazeux. Dans la publication de H. Dixon¹⁵, une note d'A. Schuster propose une formule, basée sur la théorie des ondes d'amplitude finie établie par Riemann en 1860, pour calculer la pression de détonation à partir de la vitesse de détonation mesurée : $\Delta P = P - P_0 \cong \rho_0 D^2$. C'est la « fameuse formule du $\rho_0 D^2$ » qui sera largement utilisée par les chimistes des explosifs (toujours aujourd'hui) pour évaluer la performance d'un explosif à partir d'une mesure de la célérité de détonation. Elle repose sur l'hypothèse qu'à travers une onde de grande amplitude, $\rho_0/\rho \ll 1$ dans la formule de Riemann¹⁶ $(P - P_0)/(\rho - \rho_0) = (\rho_0/\rho) D^2$ qui est une combinaison des relations de saut pour la conservation de la masse et de la quantité de mouvement. Plus tard V.A. Michelson¹ montrera que $\Delta P \cong \rho_0 D^2 / 4$.

Ces premiers travaux expérimentaux et ces premières investigations théoriques constituent les premiers éléments de la modélisation de la détonation. Une analyse de l'« histovision » (tableau 1) fait clairement apparaître trois voies de modélisation : deux basées sur les équations d'Euler, Chapman-Jouguet (« CJ », 1904) et Gribb-Zeldovitch-Von Neumann-Döring (« (G)ZND », 1943), et une basée sur les équations multiphasiques de la transition déflagration-détonation élaborées par M. Baer et J.W. Nunziato (« BN », 1986) avec les modèles de Powers et al (1990) et de Petitpas et al (2009). Ces différentes voies ont subies des évolutions au gré des avancées technologiques en matière de calcul (au départ, la règle à calcul, puis les machines mécaniques à cartes perforées, pour finir avec des ordinateurs et des supercalculateurs). Le premier ordinateur commercial est apparu en 1951 et le langage Fortran a été créé par IBM en 1957. Ces trois voies de modélisation sont identifiées dans l'histovision avec le code de couleurs suivant : orange pour la voie « CJ », bleu clair pour la voie «(G) ZND » et vert pour la voie multiphasique. Nous avons fait ressortir les grands jalons techniques qui ont influencé les évolutions des modèles et les méthodes de calcul mises en œuvre avec la couleur bleu foncé. Les contributions expérimentales majeures sont sur fond blanc.

Les travaux théoriques successifs de B. Riemann¹⁶ (1860), W. Rankine¹⁷ (1969), P.H. Hugoniot¹⁸ (1889) sont à l'origine de ces modèles de détonation. Si les équations d'Euler étaient connues dès le 18^{ème} siècle, les relations de saut n'ont été démontrées qu'au 19^{ème} siècle avec ces trois auteurs, puis agrégées, sous la forme utilisée aujourd'hui, par J. Hadamard en 1903 dans ses « Leçons sur la propagation »¹⁹. Il apparaît que P.H. Hugoniot n'a pas eu connaissance des travaux de W. Rankine et de B. Riemann, probablement à cause de la barrière de la langue et des moyens de communication limités de l'époque. L'essentiel des travaux de B. Riemann utilisés pour

la modélisation de la détonation réside dans les équations de conservation de la masse et de la quantité de mouvement à travers des ondes d'amplitude finie, leur combinaison $(P - P_0)/(\rho - \rho_0) = (\rho_0/\rho)D^2$ et la théorie des caractéristiques. L'aspect thermodynamique était restreint à une relation entre uniquement la pression et la masse volumique et ne lui a pas permis d'en déduire la relation de saut sur l'énergie totale. Elle a été introduite par W. Rankine et P.H. Hugoniot, d'où le nom de relations de Rankine-Hugoniot ou Riemann-Hugoniot pour l'ensemble des relations de saut. Elles ont été utilisées par V.A. Michelson²⁰ en 1894 et D.L. Chapman²¹ en 1899 pour modéliser la détonation selon un choc totalement réactif, mais n'ont été validées expérimentalement qu'en 1900 par P. Vieille²², dans les gaz. L'année 1900 marque aussi l'interprétation de la détonation comme un choc non réactif initiant des réactions chimiques après un certain délai, avancée par P. Vieille²². Dans les faits, le modèle « (G)ZND », proposé quarante-deux années plus tard, n'est que la mise en équations de cette interprétation de la détonation. P. Vieille avait déjà calculé le « pic de Von Neumann » pour un mélange $2H_2+O_2$ (40 bars). Il faut signaler que ce modèle est généralement noté « ZND » bien qu'il a été proposé pour la première fois, de façon très complète, par A.A. Grib²³ en Russie ; c'est avec un juste retour que nous le noterons « (G)ZND ».

Citons quelques éléments historiques qui ont contribué à l'évolution de ces modèles. La théorie des chocs avec des équations d'état arbitraires a été proposée pour la première fois en 1942, par Bethe²⁴. Elle a permis l'élaboration de lois d'état thermodynamiquement admissibles. L'apparition des méthodes de calcul numérique avec choc de Von Neumann et Richtmeyer (1950), puis de S.K. Godunov (1959) ont suscité l'élaboration de codes de calcul. Les premières simulations numériques bidimensionnelles sont apparues en 1961 avec M.L. Wilkins. Il faut signaler que le premier « Symposium de Détonation », qui s'est déroulé aux USA en 1951, a conduit à une véritable explosion de publications dans le domaine de la physique des explosifs.

Les trois voies de modélisation sont successivement décrites dans les paragraphes suivants.

2. La voie de modélisation « CJ » ou Jouguet

Cette voie de modélisation commence avec le mémoire de thèse de V.A. Michelson²⁰ en 1894. Ce mémoire a été perdu suite aux divers événements historiques survenus en Russie depuis le début du 20^{ème} siècle. Il a été réédité dans ses œuvres complètes en 1930 avec quelques ajouts, ce qui pose un problème historique sur la teneur exact de ses travaux de thèse, raison pour laquelle Michelson n'est pas associé dans le sigle « CJ ». Nous n'avons pas pu consulter cette réédition. L'historique de la découverte de l'onde de détonation écrit par N. Manson¹ en 1987 en fait une brève description. V.A. Michelson s'est appuyé sur la théorie des « chocs acoustiques » de W.J. Rankine¹⁷ et sur celles des « ondes planes d'amplitude finie » de B. Riemann¹⁶ et de S. Earnshaw²⁵, ainsi que sur les travaux de P.H. Hugoniot¹⁸. Admettant qu'une onde d'amplitude finie avec réactions chimiques peut réaliser les conditions particulières d'une détonation, il utilise les relations établies W.J. Rankine et P.H. Hugoniot pour décrire la propagation d'une détonation plane dans un mélange explosif de gaz parfaits, en considérant que les produits de détonation peuvent être décrits par un mélange de gaz de même molarité. Il ne considère que les équations de conservation de la masse et de la quantité de mouvement et examine les états possibles des produits de détonation dans le plan pression-volume spécifique définis par leurs isothermes et leurs isentropiques. Il les compare aux états définis par la droite $\frac{(P - P_0)\rho\rho_0}{\rho - \rho_0} = (P - P_0)/(v_0 - v) = (\rho_0 D)^2$ qui, à travers une discontinuité réactive, est appelée droite

de Rayleigh-Michelson. Cette droite représente les états atteints dans les produits de détonation et qui sont également définis par les deux équations de conservation de la masse et de la quantité de mouvement. Cela conduit V.A. Michelson à critiquer l'évaluation de la pression maximale des produits de détonation faite par A. Schuster et à proposer que l'état limite le plus probable, conformément au second principe de la thermodynamique, est celui de l'état d'entropie maximale

où la droite de Rayleigh-Michelson est tangente à une isentropique. Il définit ainsi l'état que nous appelons l'état « CJ » (Chapman-Jouguet) et aboutit aux relations $\frac{v_b}{v_0} \cong \frac{\gamma}{\gamma+1}$ et $P_b \cong \frac{D^2}{(\gamma+1)v_0}$ qui lie l'état des produits de détonation derrière le front (noté b) au volume massique v_0 de l'explosif frais, à la célérité de détonation D et au coefficient polytropique $\gamma = \frac{C_{P,b}}{C_{V,b}}$ (rapport des chaleurs spécifiques à pression et volume constant dans l'état des produits de détonation). Bien que V.A. Michelson n'ait pas relié la célérité de détonation D à la chaleur libérée par la réaction à travers le front de détonation en utilisant l'équation de conservation de l'énergie, il aboutit aux relations $D \cong \frac{\gamma+1}{\gamma} c_b$ et $T_b \cong \frac{\gamma}{\gamma+1} \frac{D^2}{C_{V,b}(\gamma^2-1)}$ reliant D à la célérité du son c_b dans les produits de détonation

et la température à la célérité de détonation. On en déduit aisément la relation $D \cong \sqrt{2(\gamma^2-1)Q}$, uniquement valable en gaz parfaits. Si cette dernière relation et l'équation pour la température de détonation ne sont valables qu'en mélange de gaz parfaits de même molarité pour les produits de détonation, les trois autres relations sont d'un emploi général et ne dépendent pas de l'équation d'état des produits de détonation, comme le démontrera plus tard E. Jouguet. Ces relations sont aujourd'hui devenues classiques et couramment utilisées dans les codes de thermochimie modernes pour calculer l'état de détonation des explosifs gazeux ou condensés.

En 1899, soit cinq années après V.A. Michelson²⁰, D.L. Chapman²¹ modélise la détonation stationnaire plane dans les gaz selon un choc totalement réactif en exploitant la relation de B. Riemann $(P-P_0)/(\rho-\rho_0) = (\rho_0/\rho)D^2$ et l'équation de conservation de l'énergie totale qu'il démontre lui-même dans le cas d'un mélange de gaz parfaits pour les gaz frais et les produits de détonation (D.L. Chapman ne semblait pas connaître les travaux de P.H. Hugoniot ni ceux de W.J. Rankine). A partir de ces deux équations il obtient une relation entre la célérité de détonation D et le volume massique v des produits de détonation :

$$\frac{R}{C_{V,b}} \left(Q + \frac{\mu D^2}{2v_0^2} (v_b - v_0)^2 - P_0 v_b + P_0 v_0 \frac{m}{n} \right) + mRT_0 = \frac{\mu D^2}{v_0^2} (v_0 - v_b) v_b + P_0 v_b$$

où R représente la constante des gaz parfaits, Q l'enthalpie de combustion à pression constante, la masse molaire du mélange de gaz parfaits initial, n le nombre de moles de gaz frais et m le nombre de moles de gaz dans les produits de détonation. Cette fonction $D(v)$ est non monotone et admet un minimum que L. Chapman assimile à l'état de détonation plane stationnaire. Il démontre ensuite que cet état de détonation correspond à un état d'entropie maximale dans les produits de détonation et en déduit que $\frac{v_b}{v_0} = \frac{C_{P,b}}{C_{P,b} + C_{V,b}}$ et $P_b = \rho_0 D^2 \frac{C_{V,b}}{C_{P,b} + C_{V,b}}$. En reportant cette relation

dans celle de $D(v)$ et en utilisant $R = C_{P,b} - C_{V,b}$, il obtient une équation $D(C_{V,b})$ reliant la célérité de détonation à la capacité calorifique. La capacité calorifique $C_{V,b}$ des produits de détonation du mélange gazeux varie avec la température. A cette époque, son évolution avec la température n'était pas connue. M. Berthelot, E. Mallard et M. Le Chatelier avaient tenté de déterminer les capacités calorifiques de gaz élémentaires et du dioxyde de carbone à haute température en mesurant la pression d'explosion à volume constant. Malheureusement, les diverses séries d'expériences menées par ces trois auteurs ne sont pas cohérentes entre elles et ne permettent pas d'aboutir à des valeurs utilisables. D.L. Chapman propose de calculer les capacités calorifiques à partir de mesures de vitesses de détonation en utilisant la relation $D(C_{V,b})$. Il utilise une sélection de quelques mélanges gazeux expérimentés par H. Dixon pour déterminer les capacités calorifiques à haute température de la vapeur d'eau et des espèces gazeuses diatomiques, considérées identiques à toutes températures. Leurs valeurs aux températures intermédiaires, entre l'état ambiant et les températures de détonation, sont déterminées par

interpolation. D.L. Chapman utilise ensuite ces données pour calculer les célérités de détonation de quarante et un mélanges gazeux expérimentés par H. Dixon. La cohérence entre les valeurs calculées et les valeurs expérimentales est bonne. Le modèle de D.L. Chapman permet de calculer l'état de détonation plane stationnaire complet (célérité de détonation, volume massique, pression et température dans l'état de détonation) de mélanges gazeux explosifs. La pression obtenue pour un mélange de volume égal de cyanogène et d'azote est comparable à une évaluation obtenue par Jones et Bower²⁶.

Cinq années plus tard (1904), de façon indépendante, E. Jouguet²⁷ propose une approche de la modélisation de la détonation dans les gaz basée sur l'application des relations de B. Riemann $(P - P_0)/(\rho - \rho_0) = (\rho_0/\rho)D^2$ et de P.H. Hugoniot $e - e_0 = 0.5(P + P_0)(\rho - \rho_0)/(\rho_0\rho)$ à une « quasi-onde de choc » à la traversée de laquelle « le mélange de gaz est non seulement porté à sa température d'inflammation mais encore brûlé de manière notable ». Il considère la dissociation négligeable et le mélange de gaz entièrement brûlé dans la « quasi-onde de choc ». Il exprime le fait que l'onde explosive se propage à vitesse constante en écrivant que celle-ci se déplace à une célérité sonique aval. Cette hypothèse associée aux deux relations de B. Riemann et P.H. Hugoniot permet de calculer la célérité de détonation, puis l'état de détonation complet. Utilisant une extrapolation des valeurs des chaleurs spécifiques mesurées à l'état ambiant, il calcule ainsi la vitesse de détonation de treize mélanges gazeux explosifs expérimentés par H. Dixon¹⁵, M. Berthelot et P. Vieille^{8,9}. Là aussi, la comparaison expérience-calcul est bonne, compte tenu de l'extrapolation des capacités calorifiques déterminées à l'état ambiant. En 1905, il étudia les effets de la dissociation et montra qu'« elle ne doit pas nécessairement être faible pour être négligeable »²⁸.

Dans un article de 1906, E. Jouguet²⁹ exploite l'interprétation de l'onde de détonation proposée par P. Vieille²² dans une publication portant sur la propagation des réactions chimiques dans les gaz, sans aboutir au modèle « (G)ZND » qui en est sa mise en équation. En 1917, dans son ouvrage « Mécanique des explosifs »³⁰, E. Jouguet analyse les travaux de D.L. Chapman et démontre, avec L. Crussard, que la courbe des états de chocs réactifs à partir de l'état ambiant (la courbe de Crussard), la détente isentropique issue de l'état de détonation (que l'on appellera plus tard la détente de Taylor) et la droite de Rayleigh-Michelson sont toutes trois tangentes dans l'état de détonation. Le modèle de Chapman-Jouguet, noté « CJ », est né ainsi (Figure 1). C'est un modèle toujours utilisé dans les codes de calcul thermo-chimique et dans les codes de calcul d'hydrodynamique rapide pour des applications conventionnelles. Dans son ouvrage de 1917, E. Jouguet généralise le concept de détonation sonique aval à une onde de détonation courbe, puis analyse le problème de Cauchy-Riemann¹⁹ (gradients et dérivées matérielles au front considéré comme une onde de choc totalement réactive), sans toutefois s'apercevoir que la détonation courbe, ainsi décrite, se propage au prix de gradients infinis au front qui est une limitation importante de ce modèle.



Figure 1 – Le modèle CJ en image

Le modèle CJ, considéré comme l'agrégation des trois approches de V.A. Michelson, D.L. Chapman et E. Jouguet décrit la détonation stationnaire plane. Celui de Jouguet (1917), noté « J » en est une extension aux détonations courbes. Ils ont été établis pour des mélanges de gaz.

La première application de la théorie « CJ » aux explosifs condensés date de 1913 par J. Taffanel et H. Dautriche³¹. Ces deux auteurs tentent de calculer la célérité de détonation de la dynamite en utilisant une équation d'état de Van der Waals simplifiée (Noble-Abel, $P(v-b) = nRT$ établie en 1880) pour les produits gazeux de détonation. Ces deux auteurs se sont heurtés au problème des covolumes b des gaz non identifiés dans les états thermodynamiques atteints dans la détonation des explosifs solides et ont abouti à des résultats peu convaincants. Viennent ensuite les travaux de R. Becker³², en 1922, qui analyse la théorie « CJ » dans le cas des explosifs condensés et propose une nouvelle équation d'état à hautes pressions et températures. En 1935, R.I. Scorah³³ analysa également la théorie « CJ ». Viennent ensuite les premières études d'A. Schmidt³⁴, en 1935, portant sur l'influence de la densité de chargement des explosifs solides sur la célérité de détonation et qui offriront la possibilité d'identifier les covolumes de l'équation Noble-Abel d'état à hautes pressions et températures via une méthode inverse basée sur le modèle « CJ ».

Ces avancées scientifiques conduiront à l'élaboration de la célèbre équation d'état Becker-Kitiakovsky-Wilson notée « BKW », proposée initialement par R. Becker en 1922, puis modifiée par G.B. Kitiakovsky et E.B. Wilson³⁵ en 1941. Ses covolumes sont identifiés pour représenter les célérités de détonation de la tolite et de la pentrite pour plusieurs taux de chargement. L'année 1941 marque les débuts du calcul *a priori* de l'état de détonation au moyen de calculs thermochimiques, ainsi que l'entrée dans un cycle d'amélioration des équations d'état pour les produits de détonation : parmi les plus simples, Cook ($P(v-b(v)) = nRT$, 1947), Jones-Miller ($Pv = nRT + b(T)P + b'(T)P^2 + b''(T)P^3$, 1949), des formes plus complexes comme Kihara-Hikita-Tanaka (« KHT », T. Kihara et T. Hikita, 1953), Percus-Yevick (J.K. Percus et G.J. Yevick, 1958), Jacobs-Cowperthwaite-Zwisler (« JCZ3 » proposée initialement par S. Jacobs en 1969 pour un gaz seul, puis étendue à un mélange de gaz par M. Cowperthwaite et W.H. Zwisler en 1976), MCRSR (théorie de la perturbation basée sur un potentiel en exponentiel 12 par M. Ross en 1979, puis en exponentiel 6 par F.H. Ree en 1983), H9 et H12 (extrapolation du développement du Viriel de L. Boltzmann aux états de détonation par O. Heuzé et P. Bauer, 1985), une évolution du modèle de Van der Waals par A.B. Medvedev (2006). Les premiers codes thermochimiques sont RUBY au Lawrence Livermore National Laboratory et BKW au Los Alamos National Laboratory dans la période 1961-67, suivis du code TIGER développé au Stanford Research Institute en 1970, de CHEETAH (Réécriture de TIGER en langage C en 1994), d'une suite de codes du Commissariat à l'Energie Atomique DO MAJEUR développé par J. Berger, J. Favier et Y. Nault en 1960, LA MINEUR et ARPEGE entre 1971 et 1974 sous l'impulsion de R. Chéret, ETARC par R. Chirat et G. Pittion-Rossillon en 1981-82, puis de CARTE (1998) et du code russe TDS élaboré par S. Victorov (2001). Ces divers codes offrent un choix de plusieurs équations d'état pour les gaz à hautes pressions et hautes températures pour effectuer des calculs thermochimiques de l'état CJ. Les premiers codes de simulation numérique multidimensionnelle sont apparus dans la période 1961-1967 (M.L. Wilkins et C.L. Mader).

Les limitations du modèle CJ apparaissent dès 1922, avec des observations expérimentales de la décroissance de la célérité de détonation lorsque le diamètre de l'explosif diminue, tout d'abord dans les mélanges de gaz explosifs (C. Campbell³⁶, 1922), puis dans les explosifs solides (H. Jones^{37,38}, 1928 et 1947), alors que le modèle CJ prédit une célérité de détonation stationnaire unique. Les observations expérimentales chronophotographiques de H. Jones, en 1928, montrent que la variation de la célérité de détonation en fonction du diamètre est associée à la forme courbe du front de détonation. En 1940, V. Rosing et J. Khariton³⁹ introduisent la notion de diamètre critique de détonation en-dessous duquel, la détonation cesse de se propager dans un cylindre d'explosif. Jusque là, la modélisation se limite au calcul de l'état de détonation. Ce n'est qu'en 1941 (travaux à l'époque classifiés, puis publiés en 1950) que G. Taylor⁴⁰ connecte à l'état de

détonation la détente des produits de détonation considérée isentropique, baptisée « détente de Taylor ». Il calcule, de façon quasi-analytique, la détente des produits de détonation du TNT en aval de fronts de détonation plan, cylindrique et sphérique et met en évidence la présence de gradients infinis au front de détonation dans les cas cylindrique et sphérique. Deux voies de modélisation vont être proposées pour palier ces diverses limitations : la voie « (G)ZND » dans la période 1940-1943 décrite dans le paragraphe suivant et la voie « Jouguet relaxé » proposée par L. Brun⁴¹ en 1989. Cette seconde voie est dans la lignée directe de la théorie d'E. Jouguet pour les détonations courbes. Rappelons que dans cette théorie l'onde de détonation est décrite par une onde de choc réactive sonique en son aval où les réactions sont terminées. L. Brun relaxe cette dernière hypothèse et considère une onde de choc partiellement réactive sonique en son aval où les réactions chimiques ne sont pas terminées. La mise en équation de cette approche se traduit par une relation accélération-célérité-courbure de l'onde de détonation $\frac{dD}{dt} = 2C^2(D)(K(D) - C)$ où

$C^2(D)$ et $K(D)$ sont deux fonctions maîtresses dépendant de l'équation d'état de l'explosif en cours de réaction et de la vitesse de combustion résiduelle en aval du front sonique. En tout point d'accélération nulle (détonation stationnaire, sur l'axe d'une cartouche cylindrique), la célérité de détonation ne dépend que de sa courbure, fonction intrinsèque à l'explosif. Dans un massif d'explosif, la détonation se courbe sous l'effet d'ondes de front latérales provenant des bords du massif. Dans la même période, une équipe russe⁴² introduit la notion de courbure totale critique en dessous de laquelle la détonation cesse de se propager, pour reproduire les diverses dimensions critiques de détonation (diamètre en cylindre d'explosif et épaisseur en plaque d'explosif). Le modèle « Jouguet relaxé », associé à cette notion de courbure critique, parachève la modélisation d'E. Jouguet. Il permet de reproduire les variations de la célérité de détonation avec les dimensions latérales de l'explosif via la relation accélération-célérité-courbure du front. Malheureusement, il reste limité à des ondes de détonation divergentes.

L'arrivée de la petite informatique (ordinateurs de bureau en 1968, calettes programmables en 1973), va inciter le développement de méthodes simplifiées de calcul des caractéristiques de détonation baptisées « short method » par la communauté scientifique anglo-saxonne. Citons la plus célèbre élaborée par M.J. Kamlet⁴³ en 1968, programmable sur une machine HP 9100 sortie la même année, qui permet de calculer les caractéristiques CJ d'un explosif C-H-O-N à partir des relations CJ et de corrélations élaborées par ce même auteur et S.J. Jacob. Elle a été suivie d'extensions à des explosifs C-H-O-N-F-Cl-Al par plusieurs auteurs cités dans l'« historisation ». En 1998, O. Heuzé et P. Bauer⁴⁴ réaliseront une réduction d'un code thermochimique basé sur l'équation d'état H9 des produits de détonation pour calculer l'état CJ d'un explosif C-H-N-O. Cet outil de calcul sera également étendu à des explosifs C-H-O-N-F-Cl-Al par G. Baudin⁴⁵ avec le concours d'O. Heuzé, en 1993. C'est toujours un sujet d'actualité comme en témoignent les travaux récents (2003-2009) de M.H. Keshavarz et al⁴⁶, de l'Institut de Technologie de Malek-Ashtar en Iran.

L'année 1973 est celle de la célèbre équation d'état Jones-Wilkins-Lee (« JWL ») publiée par E.L. Lee, H.C. Horning, W. Kury⁴⁷, qui a été et qui est toujours largement utilisée dans les codes de calcul d'hydrodynamique rapide malgré ses fondements empiriques. Les paramètres de cette équation d'état sont soit identifiés pour reproduire la vitesse de relèvement d'un cylindre en cuivre par explosif, soit à partir de calculs thermochimiques de la détente isentropique issue de l'état de détonation dans les codes modernes (CARTE, CHEETAH, TDS). Le code CHEETAH va jusqu'à fournir un équivalent TNT de l'explosif basé sur le travail des produits de détonation à plusieurs taux de leur expansion.

Les premières applications du modèle « CJ » à des applications militaires (publiées) datent de 1944 avec W. Trinks⁴⁸ pour calculer des implosions dans lesquelles il tentait, avec Gerlach, de créer des conditions de fusion du deutérium. Si ces premières tentatives restèrent sans succès, elles contribuèrent largement au projet de l'arme nucléaire allemande pendant la seconde guerre mondiale. La seconde application identifiée est celle des charges creuses en 1948 puis,

probablement les applications nucléaires dès 1942 qui sont classifiées. Cette nouvelle motivation va accélérer les études de détoniques fines et l'élaboration de modèles plus sophistiqués, comme le modèle « (G)ZND » présenté dans le paragraphe suivant.

3. La voie de modélisation Zeldovitch-Von Neumann-Döring (« (G)ZND »)

Quatre scientifiques ont contribué de façon indépendante au développement de cette voie de modélisation : A. Grib²³ et Ja. B. Zeldovitch⁴⁹, en 1940, J. Von Neumann⁵⁰ en 1942 et W. Döring⁵¹ en 1943. Dans une première étape, le modèle de détonation est unidimensionnel plan stationnaire. Sa mise en équation est la traduction mathématique de l'idée de P. Vieille (1900) où la détonation est considérée comme un choc non réactif initiant des réactions de combustion après un certain délai. Il est constitué des relations de Rankine-Hugoniot pour représenter le choc, à travers lequel l'explosif reste inerte, et des équations d'Euler complétées par une équation de production massique des produits de détonation pour résoudre la zone de réaction (la cinétique chimique). La détente de Taylor est connectée à l'état de détonation correspondant à la fin des réactions de combustion via les équations d'Euler seules. En 1942, Ja. B. Zeldovitch⁵² étend cette approche aux ondes de détonation courbes et établit la relation $D^{-2} = D_{\infty}^{-2}(1 + \alpha d^{-2})$ reliant la célérité de détonation au diamètre d'une cartouche cylindrique, où α est une constante reliée à l'épaisseur de la zone de réaction et aux caractéristiques du confinement de la charge explosive cylindrique. Dans une simulation numérique, la zone de réaction chimique doit être résolue pour propager correctement l'onde de détonation et restituer les effets des détentes latérales sur la forme du front et, par voie de conséquence, sa courbure. Ce modèle est donc apte à reproduire un diamètre critique de détonation, ainsi que la variation de la célérité de détonation avec le diamètre d'un cylindre d'explosif via les effets de courbure.

A l'origine, ce modèle a été établi pour des mélanges de gaz parfaits explosifs où l'accès à une cinétique détaillée dans la zone de réaction a été rendue possible grâce aux études de combustion dans les gaz à des pressions et des températures pas trop éloignées des états de détonation atteints en régime établi. Pour les explosifs condensés, le principal problème est la connaissance de la vitesse de combustion entre le choc non réactif (baptisé « pic de Von Neumann » ou « VN ») et la fin des réactions de combustion irréversibles où les pressions atteignent plusieurs centaines de milliers de bars et les températures, plusieurs milliers de K. C'est cette vitesse de combustion qui règle l'épaisseur de la zone de réaction. Par ailleurs, pour obtenir un écoulement réactif complètement résolu dans la zone de réaction, il faut utiliser des mailles de calcul de taille inférieure à 50 micromètres pour une zone de réaction millimétrique (H. Jourden, voir communication aux journées Paul Vieille, cette année), typique de la majorité des explosifs classiques. L'évolution de la puissance de calcul des supercalculateurs entre 1951 et 2009 va permettre de calculer la propagation de la détonation dans les explosifs condensés de façon directe en résolvant l'écoulement dans leur zone de réaction, sous réserve de connaître de façon suffisamment précise la vitesse de combustion et les équations d'état de l'explosif en cours de combustion dans la zone de réaction.

Les modèles « (G)ZND » et « CJ » conduisent à des états de détonation donnés par des relations identiques dans le cas d'une détonation plane stationnaire. Ce constat permet d'utiliser les codes thermochimiques développés dans le cadre du modèle « CJ » pour calculer la détente isentropique des produits de détonation puis d'identifier une équation d'état globale pour les représenter, « JWL », par exemple. C'est aujourd'hui réalisé en standard dans les codes thermochimiques modernes (CHEETAH, CARTE).

Entre 1943 et 1951, date correspondant à l'apparition des premiers ordinateurs et schémas numériques avec choc, H. Jones⁵³ et H. Eyring⁵⁴ et al élaborèrent des modèles basés sur une réduction du modèle « (G)ZND » pour représenter la relation célérité-diamètre ou célérité-courbure de détonation en cartouche cylindrique d'explosif via l'épaisseur de la zone de réaction. Le modèle

d'Eyring et al conduit à la relation célérité-diamètre $D \cong D_\infty(1 - ad^{-1})$, a dépendant de l'épaisseur de la zone de réaction et du confinement : $a = e_{ZR}$ dans une charge non confinée et $a = 4.34e_{ZR}M_e / M_c$ dans une charge confinée avec un rapport de masse d'explosif sur celle du confinement M_e / M_c . Ce modèle est encore utilisé aujourd'hui pour obtenir une approximation de l'épaisseur de la zone de réaction à partir d'une relation célérité-diamètre déterminée expérimentalement.

En 1954, W. Wood et J. Kirkwood⁵⁵ analysent les particularités du modèle « (G)ZND » dans le cas de la détonation courbe stationnaire sur l'axe d'une cartouche cylindrique d'explosif lorsque l'écoulement est faiblement divergent (rayon de courbure du front est très supérieur à l'épaisseur de la zone de réaction et dimension latérale de la charge explosive est grande devant l'épaisseur de la zone de réaction). Ils en déduisent la condition CJ, $\sigma \frac{dY_P}{dt} + \frac{2(D-u(r_0))}{R_c} = 0$, généralisée à

l'onde de détonation courbe lorsque le nombre de Mach $M = \frac{D-u}{c}$ est égal à 1 (à la frontière

sonique). La dérivée temporelle $\frac{dY_P}{dt}$ représente la vitesse de combustion, $\sigma = \frac{1}{\rho c^2} \left(\frac{\partial P}{\partial Y_P} \right)_{e,v}$ la

thermicité et R_c le rayon de courbure sur l'axe. L'écoulement réactif est subsonique entre le « pic de Von Neumann » et la frontière sonique, puis supersonique en aval de cette dernière. Uniquement la partie subsonique de la zone de réaction contribue à la propagation de l'onde de détonation. Les équations d'Euler réactives, écrites en régime stationnaire dans un repère lié au front de détonation sur l'axe de la cartouche, peuvent être intégrées à partir du « pic de Von Neumann » pour calculer, d'une part, la structure interne de la détonation jusqu'à la frontière sonique, d'autre part, la relation célérité-courbure de détonation, connaissant les lois d'état de l'explosif en cours de combustion et la vitesse de réaction. De façon inverse, une méthode basée sur l'intégration de ces équations, avec pour données les lois d'état et la relation célérité-courbure du front de détonation, permet d'identifier la vitesse de combustion. Plusieurs logiciels sont basés sur cette approche pour accéder à la vitesse de combustion dans la zone de réaction stationnaire. La théorie de W. Wood et J. Kirkwood a été reprise, quelques années plus tard, par S.K. Chan⁵⁶ dans un formalisme légèrement différent et appliquée pour accéder à la vitesse de combustion dans la zone de réaction de divers explosifs.

En 1981 J.B. Bdzil⁵⁷ généralise la théorie de W. Wood et J. Kirkwood tout le long du front de détonation dans le cas d'un écoulement faiblement divergent par rapport au vecteur normal au front de détonation. En 1988, il donne ainsi naissance, en coopération avec D.S. Stewart, à la théorie de la détonation instationnaire courbe « Detonation Shock Dynamics »⁵⁸, notée « DSD », dans l'objectif d'éviter de résoudre l'écoulement réactif dans la zone de réaction dans un code de calcul d'hydrodynamique multi-dimensionnel. Cette théorie comporte deux parties distinctes : (1) la description de l'écoulement dans la zone de réaction de l'onde de détonation courbe instationnaire, (2) la description géométrique de la propagation de l'onde de détonation dans un massif explosif de forme donnée. Ces deux auteurs aboutissent à une relation célérité-courbure du front de détonation pouvant être calculée au moyen de la description de l'écoulement dans la zone de réaction connaissant les lois d'état de l'explosif en cours de combustion et sa vitesse de réaction. En toute rigueur, c'est un modèle de propagation du front de détonation, donc du choc initiateur des réactions chimiques. Il est cependant utilisé pour propager le front de détonation puis calculer l'écoulement en son aval sans considérer la zone de réaction, d'une manière analogue au modèle de Jouguet, ce qui, à notre sens, conduit à des gradients infinis au front de manière identique au modèle d'E. Jouguet courbe.

En 1982, C.M. Tarver⁵⁹, du Lawrence Livermore National Laboratory, proposa une extension du modèle « (G)ZND » comprenant des processus de relaxation thermique précédant et suivant les

réactions chimiques de combustion. Ce modèle est baptisé « NEZND » pour « Non Equilibrium ZND ». Une version russe⁴² de cette approche a également été proposée dans le livre « Physique des Explosions », en russe. Même si ces modèles proposent des mécanismes à l'échelle moléculaire, ils restent cependant macroscopiques et basés sur le concept d'équilibre thermodynamique local. Les produits de réaction et l'explosif non réagi sont en équilibre mécanique et thermique.

L'utilisation de particules métalliques réactives dans les explosifs (aluminium, par exemple), tout d'abord en 1917 pendant la première guerre mondiale (Ammonal, TNT-NA-Al 67-22-11), puis avec les travaux de A.F. Belyaev⁶⁰ en 1954 et de M.A. Cook⁶¹ et al en 1956, conduit à des détonations ne pouvant plus être décrites selon le modèle « CJ » qui, rappelons-le, est la limite du modèle « (G)ZND » dans le cas d'une détonation plane stationnaire. Ces explosifs sont dits « non idéaux ». Un explosif est dit « idéal » s'il suit le modèle « CJ » en détonation stationnaire plane. Les explosifs à base de nitrate d'ammonium ou de perchlorate d'ammonium peuvent également présenter un caractère non idéal, ainsi que les explosifs contenant du tungstène ou du plomb qui se comportent comme des inertes lors de la détonation (les DIME, « Dime Inert Metal Explosives »).

Selon leur composition, les « explosifs non idéaux » peuvent présenter des zones de réactions subsoniques centimétriques conduisant à de forte variation de leur célérité de détonation avec le diamètre en cartouche cylindrique. D'une façon générale, la détonation d'un explosif sous-carboné forme des produits de détonation susceptible de brûler avec l'oxygène de l'air via un processus de combustion turbulente lors de leur expansion (réactions aérobies). Dans le cas des « explosifs non idéaux » fortement chargés en aluminium, ces réactions de combustion secondaires sont accrues et peuvent se produire de façon concomitante avec des réactions de combustion anaérobies dans la détente des produits issus de la détonation. Les réactions de combustion aérobies libèrent une énergie qui est peut être jusqu'à trois fois supérieure à l'énergie libérée par la détonation seule. La Figure 2 illustre cet aspect. Nous voyons ici que le fonctionnement d'un explosif ne consiste pas uniquement en sa détonation, mais aussi à des réactions de combustion anaérobies, et aérobies dont l'historique n'est pas abordé dans cette communication.

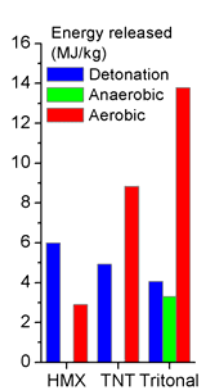


Figure 2 – Energies mises en œuvre en détonation, combustions anaérobie et aérobie

Le développement de tels explosifs a été motivé par leurs effets balistiques progressifs par rapport à un « explosif idéal », ainsi que par leurs effets de souffle particulièrement importants. L'idée de développer de tels explosifs est apparue dans les années 1980 pour le chargement de corps de bombes à emploi générale et de charges à éclats pré-fragmentés pour éviter une sous-fragmentation secondaire. Citons quelques exemples issus de la littérature américaine : PBXN-109 (RDX-Al-liant 64-20-16), PBXW-114 (HMX-Al-liant 78-10-12), PBXW-115 (RDX-AP-Al-liant 20-43-25-12), Tritonal (TNT-Al 80-20), H6 (RDX-TNT-Al-liant 45.1-29.2-21-4.7).

Examinons le cas des explosifs à base d'aluminium. Deux interprétations ont été avancées : (1) les particules d'aluminium brûlent dans la zone de réaction pour former des produits de détonation

constitués de gaz et de particules d'oxydes en déséquilibre thermique qui vont se relaxer en température via des échanges de chaleur dans la détente de Taylor (C.L. Mader⁶², 1979, McGuire et al⁶³, 1981 et M. Cowperthwaite⁶⁴, 1993), (2) les particules métalliques restent inertes dans la zone de réaction et brûlent avec les produits gazeux de détonation dans la détente de Taylor (les autres auteurs, notamment par M. Finger et al⁶⁵ et dont nous faisons partie). Des modèles ont été développés de façon indépendante selon ces deux approches avec une production importante de publications en 1993, au Symposium de Détonation : M. Cowperthwaite pour la première interprétation, R.H. Girguis et P.J. Miller⁶⁶, W.S. Tao et al⁶⁷, G. Baudin et D. Bergues⁶⁸, ainsi que D.L. Kennedy et D.A. Jones⁶⁹ pour la seconde interprétation de la détonation. Aujourd'hui, pratiquement tous les scientifiques s'allient à la seconde interprétation de la détonation qui semble la plus probable du fait de la taille des particules utilisées (supérieure au micromètre). Chaque centre conservera son modèle.

L'année 1993 fut également celle où B.C. Béard et al⁷⁰ introduirent l'application potentielle de nanoparticules d'aluminium dans les explosifs. Cinq années plus tard, P.J. Miller et al⁷¹, ainsi que G. Baudin et al⁷², ont publiés leurs premiers travaux sur la combustion de nanoparticules d'aluminium dans divers explosifs (NM, TNT, ...), mettant en évidence des évolutions de leur célérité de détonation stationnaire avec la taille des particules. Les nanoparticules ont pour effet de diminuer la célérité de détonation stationnaire. Cet effet a également été démontré par M.F. Gogulya et al⁷³ en 2008 dans des nano-composites à base d'octogène et d'aluminium. Il apparaît ainsi une nouvelle limitation des modèles de détonation « CJ » et « (G)ZND ». G. Baudin et al⁷², en 1998, ont avancé l'hypothèse d'un déséquilibre thermique entre les produits gazeux de détonation et les particules métalliques pour expliquer cet effet. Cette hypothèse a été récemment reprise dans de nouvelles investigations pour modéliser la détonation dans un cadre multiphasique, seul capable de prendre en compte des déséquilibres mécaniques et thermiques. Le paragraphe suivant décrit les avancées de cette nouvelle approche de la détonation.

4. L'approche multiphasique

Le modèle parent est le modèle diphasique de M. Baer et J.W. Nunziato⁷⁴ publié en 1986 où les différentes phases (phase solide, produits de réaction gazeux) sont en déséquilibre mécanique et thermique. Initialement, ce modèle a été développé pour calculer la transition déflagration-détonation. Entre 1987 et 1990, J.M. Powers, D.S. Stewart et H. Krier⁷⁵ exploitent l'interprétation de la détonation proposée par P. Vieille dans le cadre de cette approche et élaborent une théorie de la détonation diphasique stationnaire plane. Un point délicat de cette approche réside dans le fait que certaines équations établies par M. Baer et J.W. Nunziato n'admettent pas de relations de saut. Pour contourner ce problème, J. Powers et al considèrent qu'à travers le choc, la combustion, les relaxations de pression et vitesse matérielle (traînée), les transferts de chaleur et la compaction n'ont pas le temps de s'établir et peuvent être négligés. Ils obtiennent ainsi des relations de saut diphasique fournissant le pic « Von Neumann » à partir duquel les équations du mouvement diphasique peuvent être intégrées pour accéder à la structure de l'écoulement. Ce modèle restera sans application, en raison de son grand nombre de paramètres à identifier, dont la viscosité de compaction et les coefficients de relaxation des vitesses matérielles et des pressions.

Les années 2000 vont apporter un second souffle à cette approche avec (i) la réduction du modèle de M. Baer et J.W. Nunziato à un écoulement en équilibre mécanique, par A. Kapila et al⁷⁶ en 2001, où les pressions et vitesses sont relaxées mais pas les températures et (ii) l'établissement d'une nouvelle modélisation baptisée « DEM » (Discrete Equations for Multiphase Mixtures) par R. Abgrall et R. Saurel⁷⁷ en 2003, qui se présente sous une forme numérique directement utilisable dans un code de calcul. Ce modèle a été utilisé par A. Chinnayya et al⁷⁸, en 2004, pour modéliser la détonation dans un explosif idéal liquide, le nitrométhane, et dans un explosif fortement non idéal, RDX-PA-AI-PBHT 20-43-25-12 (PBXW-115 ou PBXN-111). Ces auteurs ont également recherché la limite continue de ce modèle, ainsi que sa limite lorsque les pressions et vitesses matérielles sont relaxées. Ils obtiennent ainsi, d'une part, le modèle de M. Baer et J.W. Nunziato⁷⁴

où les coefficients de relaxation sont exprimés en fonction des impédances acoustiques des diverses phases et, d'autre part, le modèle réduit en équilibre mécanique de A. Kapila et al⁷⁶. En 2007, R. Saurel⁷⁹ et al établirent les relations de saut pour des mélanges multiphasiques, compatible avec le modèle réduit d'A. Kapila et al.

L'ensemble de ces avancées techniques va permettre d'élaborer un modèle de détonation multiphasique à l'équilibre mécanique, mais hors équilibre thermique, publié par F. Petitpas et al⁸⁰ en 2009. Ce modèle, qui prend en compte les échanges de chaleur entre phases, offre de nouvelles possibilités pour calculer la détonation d'explosifs fortement hétérogènes. A titre d'exemple, il a été appliqué avec succès à des explosifs bi-liquides tétranitrométhane-nitrobenzène ensemencés en particules d'aluminium (G. Baudin et al⁸¹, 2007 et 2008). Ce modèle est récent et son utilisation dans la communauté de détonique demande de plus amples validations.

Conclusion

Jusqu'en 1950, l'historique de la détonation est assez complet, grâce aux chronologies de P.A. Bauer, E.K. Dabora et N. Manson effectuées successivement en 1987, 1991 et 1993, ainsi que celle d'O. Heuzé réalisée en 2009. Après le premier symposium de détonation, en 1951, la multitude de publications parues en littérature ouverte rend difficile un historique exhaustif.

Trois voies de modélisation ont été identifiées (« Chapman-Jouguet », « (Grib)-Zeldovitch-Von Neumann-Döring » et multiphasique), et successivement présentées dans ce document.

La détonation des « explosifs idéaux » est aujourd'hui assez bien calculée avec une précision qui est passée de plusieurs dizaines de pourcents en 1913, dans les travaux de J. Taffanel et H. Dautriche, à moins du pourcent dans les codes de calcul thermochimique modernes, ce qui permet d'identifier de façon indépendante la réaction de combustion dans la zone de réaction. Ainsi, le calcul de la propagation de la détonation est de plus en plus précis pour ce type d'explosif, que ce soit dans les applications à usage nucléaire ou dans les armes conventionnelles, via le trio équation d'état-cinétique-loi de mélange. Il reste encore quelques exceptions, comme le peroxyde d'hydrogène où le calcul thermochimique est en défaut avec le code Cheetah du Lawrence Livermore National Laboratory.

Le problème d'identification de lois d'état macroscopiques capables de décrire les divers trajets thermodynamiques subis par les produits de détonation (détente, rechoc, ...) subsiste. Ces lois d'état sont généralement identifiées pour reproduire la détente isentropique à partir de l'état de détonation de « Chapman-Jouguet », mais pas nécessairement des évolutions en-dehors de celle-ci en détonation courbe ou lors de chocs secondaires. Leurs identifications restent encore un problème aux grands taux de détente où se produisent, pour la majorité des explosifs, des réactions de combustion aérobies.

Il subsiste également le problème de la modélisation de la détonation des « explosifs non idéaux », rendue difficile par la diversité de leur fonctionnement détonique selon leur composition, et ceci, d'autant plus qu'ils mettent en œuvre des réactions de combustion à la fois dans la zone de réaction subsonique derrière le front de détonation et dans la détente des produits de détonation par combustion anaérobie et aérobie. Il n'existe pas, à ce jour, une modélisation continue de l'ensemble de ces phénomènes. La modélisation multiphasique en équilibre mécanique et hors-équilibre thermique peut ici apporter de nouvelles possibilités. Elle nécessite cependant de plus amples validations.

Les études historiques de P.A. Bauer, E.K. Dabora, N. Manson^{1, 82, 83} et d'O. Heuzé⁸⁴ ont grandement facilité ce travail. C'est en hommage à N. Manson et aux fondateurs des modèles de détonation que je vais citer cette phrase reprise de l'« *Historique de la découverte de l'onde explosive* » (N. Manson 1987) :



« 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 ».









Extrait de M. Berthelot, « *Sur la force des matières explosives d'après la thermochimie* », 1883.






Remerciements : Je tiens à remercier l'A3P de m'avoir invité à réaliser cette communication aux Journées Paul Vieille 2009 et tout particulièrement R. Saurel pour ses encouragements et M. Pérez pour ses conseils. Je remercie également O. Heuzé qui m'a cédé sa bibliographie historique sous forme électronique, ainsi que mes collègues américains et russes qui m'ont aidé, plus particulièrement C. Tarver du « Lawrence Livermore National Laboratory », aux USA, V. Belsky et V. Raevsky du VNIIEF, en Russie, et B. Khasainov du « Laboratoire de Combustion et de Détonique de Poitiers », en France.








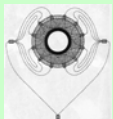


Gramat, le 27 octobre 2009.

Tableau 1 : « Histovision » de la modélisation de la détonation





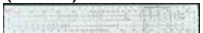


Année	Périodes historiques	Explosifs	Modélisations	Photos	Motivations	Moyens de calcul
XV ^{ème}	Moyen âge	Fulminates d'Or (B. Valentius)				
XVII ^{ème}	Epoque moderne	Fulminates d'or (or explosif) Ag, Hg, (C. Van Drebbel				
1659		NA et chlorate de potassium (J.R.Glauber)				
1771		Acide picrique (P. Woulfe)				
1833		NC (H. Braconnot)				
1846	Epoque contemporaine	NG (A. Sobrero),				
1847		Coton poudre (Schonbein)				
1863	Expansion européenne outre-mer	Industrialisation			Génie civil	
1964		NG & 1 ^{er} détonateur (A.B. Nobel)				
1867		Dynamite (A. Nobel)				
1872		NM (V. Meyer et O. Stuber)	F.A. Abel : détonation / déflagration dans les explosifs condensés			
1873			F.A. Abel : 1 ^{ère} mesures de D dans les condensés & théorie des vibrations synchrones			
1874			L.P. Roux et E. Sarrau : Les effets de la dynamite			


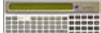





Année	Périodes historiques	Explosifs	Modélisations	Photos	Motivations	Moyens de calcul
1878 1883	Empire outre-mer	Commission des substances explosives 	M. Berthelot & P. Vieille, E. Mallard & H. Le Chatelier: découverte de la détonation dans les gaz M. Berthelot : 1 ^{ère} théorie de la détonation		Prévenir les explosions de grisous (Commission française du grisou : 1877)	
1883		TNT (J. Wilbrand)				
1888		1 ^{ère} synthèse TATB				
1891		PETN (Tollens et Wigand)				
1893			H. Dixon : Mesures de vitesse de détonation dans des mélanges de gaz Théorie de A. Schuster			
1894			Théorie de V.A. Michelson			 Tavernier-Gravet Mannheim 50 cm (1881)
1899		RDX (G.F. Henning)	Théorie de D.L. Chapman			
1900			P. Vieille : Démonstration expérimentale de la validation de la relation d'Hugoniot & idée « ZND » dans les explosifs gazeux C.E. Bichel : mesures de D, condensés			 Tavernier Gravet (1900)
1904			Théorie de M.E. Jouguet Naissance du modèle « CJ »			



Année	Périodes historiques	Explosifs	Modélisations	Photos	Motivations	Moyens de calcul
1906		1 ^{ère} synthèse ONTA				
1913			J. Taffanel & H. Dautriche : 1 ^{ère} application de la théorie CJ aux explosifs condensés H. Kast : Mesures de D dans les explosifs condensés		Applications aux bombes d'emploi général	
1917	1 ^{ère} guerre mondiale	1 ^{ère} utilisation de l'Al, : Ammonal, TNT-NA-Al	M.E. Jouguet : livre « Mécanique des Explosifs »			
1918						
1922		 Les années folles	R. Becker : analyse de la théorie CJ & EOS à hautes pressions - températures		Apparition des limites du modèle CJ : vitesse de détonation non constante	
			C. Campbell : variations vitesse de détonation - diamètre dans les gaz			
1928			H. Jones : front courbe & variations vitesse de détonation - diamètre dans les condensés (NG, DyK)			
1935			R. I. Scoriah : utilisation EOS Noble Abel A. Schmidt : D() pour identifier une EOS			
1938			A.J. Apine : mécanisme de décomposition couche par couche			
1940	2 ^{ème} guerre mondiale	HMX (W.E. Bachmann)	V. Rosing, & J. Khariton : diamètre critique de détonation		Applications aux bombes d'emploi général	 Tavernier-Gravet Physicien 26cm (1938)
			Grib : Théorie de la détonation plane Ja. B. Zeldovitch : Théorie de la détonation plane			





Année	Périodes historiques	Explosifs	Modélisations	Photos	Motivations	Moyens de calcul		
1941	2 ^{ème} guerre mondiale		A. Schmidt : mesures de $D(\)$ dans le TNT et la PETN					
1942			G. B. Kistiakovsky & E. B. Wilson : EOS BKW & calcul CJ a priori		Amélioration des lois d'état & Développement de codes thermochimiques			
			G.I. Taylor : Détente des produits de détonation, déclassifié en 1950					
			Bethe et Weyl : choc & EOS arbitraire					
				Brinkley & Wilson : calcul CJ a priori				
				J. Von Neumann : Théorie de la détonation		Course à l'arme nucléaire		
				Ja. B. Zeldovitch : théorie de la détonation courbe & limite de la détonation CJ dans les gaz				
1943		W. Döring : théorie de la détonation → modèle (G)ZND			Machines mécaniques à cartes perforées			
1943 1945		Pokrovsky, Landau & Staniukovitch : modélisation semi-empirique de $D(\)$ pour le TNT, PETN, et l'acide picrique						
1948	Guerre froide	1 ^{er} ordinateur SSEC IBM, W. Eckert						
1947 1949			H. Jones : Théorie de de la détonation en cartouche cylindrique (détentes latérales, épaisseur de ZR)					
1949			W. B. Cybulsky et al : influence des divers paramètres sur la vitesse de détonation					

Année	Périodes historiques	Explosifs	Modélisations	Photos	Motivations	Moyens de calcul	
1949	Guerre froide		H. Eyring et al : « The stability of detonation », célérité – courbure, et « starvation kinetic » moléculaire			 ENIAC (1950)	
1950		Von Neumann & Richtmyer : méthode de calcul numérique avec choc				 UNIVAC 1 (1951)	
1951		1 ^{er} symposium international de détonation 1 ^{er} ordinateur commercial UNIVAC 1					
1953			T. Kihara & T. Hikita : EOS KHT			Détonation des explosifs non idéaux	
1954		Etudes particules d'Al / Explosif (A.F. Beliaev)	W. W. Wood & J. W. Kirkwood : modèle ZND stationnaire courbe & condition CJ généralisée				
1956			M.A.Cook et al : Vitesse de réaction du nitrate d'ammonium en détonation				
1957		Naissance du langage informatique Fortran (IBM)				Entrée dans l'ère de la simulation numérique	 CDC 1604 (1958)
1959		S.K. Godunov : méthode de calcul numérique avec choc					
				Hubbard & Johnson : pionniers de la simulation hydrodynamique 1D			 IBM 7030 Stretch (1961)
1961		1 ^{ère} simulation numérique 2D (M.L. Wilkins)					
1963			Bernier : combustion guidée par la pression				
1963			C.L. Mader : simulation numérique 1D, 2D, code thermochimique BKW			Naissance de la petite informatique : incitation à la simplification	 HP 9100
1967		H.B. Levine & R.E. Sharples : code thermochimique RUBY					
1968		N. Dremine : phénomènes critiques de détonation dans les liquides & stabilité					
		M.J. Kamlet & S. J. Jacob : méthode simple de calcul des caractéristiques de détonation (explosifs CHNO)					

Année	Périodes historiques	Explosifs	Modélisations	Photos	Motivations	Moyens de calcul	
1969	Guerre froide		S. Jacobs : EOS « JCZ »			 CDC 7600 SCRAY (1969)	
			R. Kh. Kurbangalina : diamètre critique de détonation d'explosifs liquidesensemencés de particules				
1970			Redécouverte ONTA (SNPE, France & LANL, USA)	C. Brochet et al, R. Chéret & G. Verdes : détonation cylindrique et sphérique dans les condensés			
				M. Finger et al : HMX/Al, effets balistiques			
1973				C. Tarver : Modèle « NEZND »			 HP35 HP 65 (1972)
				E. Lee, M. Finger, W. Collins : équation d'état JWL des produits de détonation			 Graphoplex-1600
1974				R. Chéret : calculs thermochimiques ARPEGE, RDX-Al 85-15 Al(i), Al(r) <i>Calculs similaires : Mader en 1979, Cowperthwaite, Hobbs & Baer en 1993.</i>			
1975				Teychenne de Blazi : 1 ^{ères} mesures de célérités et de températures de détonation dans des mélanges NM-Al.			
1976				C.L. Mader & C.A. Forest : modèle 2D de propagation de détonation			 CRAY-1 1976
1976 1979				A.W. Campbell & R. Engelke : données expérimentales D – diamètre, PBX-9404, Comp-B, X0219, NM-SiO ₂			
1978 1979				C.A. Forest : Modèle Forest-Fire			Amélioration des modèles de combustion dans la ZR
		Modèle d'amorçage et détonation de G. Cochran & J. Chan : cinétique chimique					

Année	Périodes historiques	Explosifs	Modélisations	Photos	Motivations	Moyens de calcul	
1979	Guerre froide		B. Khasainov et al : formation d'ondes de compression secondaire derrière l'état CJ		Amélioration des modèles de combustion dans la ZR		
			W Ficket & WC Davis : Detonation CL Mader : « Numerical Modeling of Detonation »				
1980			Modèle Ignition & Growth de Lee & Tarver			 SHARP 1211 (1980)	
1981			M.N. Makhov & V.I. Pepekin : méthode simple de calcul de la composition CJ				 IBM PC (1981) Pub ZX81
			J.B. Bdzil : Détonation 2D stationnaire – Généralisation du modèle Wood et Kirkwood				
			D.L. Ornellas : calorimètre de détonation – chaleur & produits de détonation				
1983			Y. Kato et al : mesures de célérité et de température de détonation de NM-AI				
1986			HNW ou CL20 (1987, Nielsen)	M. Baer & J.W. Nunziato : Modèle B-N multiphasique de transition déflagration-détonation		Modélisation de la déflagration / détonation	CRAY XMP (1982)
1989			D.S. Stewart & J.B. Bdzil : Modèle de propagation « DSD » de la détonation			Propager la détonation sans calculer la zone de réaction	
			L. Brun : Modèle de propagation « Jouguet-relaxé » (J-r) de la détonation				
	O. Heuzé & P. Bauer : méthode thermochimique réduite - calcul CJ						
1990	J.M. Powers et al : théorie de la détonation diphasique						

Année	Périodes historiques	Explosifs	Modélisations	Motivations	Moyens de calcul		
1991		Particules d'Al et de PA dans du TATB (D. Breithaupt et al)	I.F. Kobilkin, V.S. Soloviev & M.M. Boiko : Modèle de type Jouguet relaxé & courbure critique	Exploiter les effets balistiques, de souffle et sous-marins renforcés	 POWER BOOK 100		
			D.A. Jones et D.L. Kennedy : Application du modèle Wood-Kirkwood au PBXW-115 (RDX-PA-Al-PBHT) – code CPEX				
1993			D.C. Swift & B.D. Lambourn : Modèle de détonation WBL (similaire à DSD)				
		<i>Equation d'état dépendante du temps</i>	R.H. Guirguis & P.J. Miller : Modèle de détonation pour un mélange explosif-Al, sans chimie explicite				
		<i>Extension du modèle « Ignition & Growth » de Lee-Tarver</i>	W.S. Tao, C. Tarver et al : Modèle de détonation pour un mélange explosif-Al, sans chimie explicite				
		<i>Extension du modèle « Johnson-Tang-Forest » avec une loi de Vieille</i>	G. Baudin & D. Bergues : Modèle de détonation pour un mélange explosif-Al, Al brûle avec CO ₂				
		<i>Combustion de l'Al dans la ZR jusqu'à CJ</i>	M. Cowperthwaite : Modèle de de de détonation pour un mélange explosif-Al, Al brûle avec H ₂ O & CO ₂ selon le modèle de Bartett (1963)				
			D.L. Kennedy : Modèle de détonation pour un mélange RDX-PA-Al-PBHT multi-cinétiques				
			G. Baudin : extension de microQ (O. heuzé) à des explosifs CHNOFCIAI, Al hors équilibre thermique				
			S. Lécume et al : entraînement en détonation de l'aluminium dans des mélanges HMX-liant actif-Al				
			B.C. Béard et al : applications potentiels de nanoparticules d'aluminium dans les explosifs				
1994					P. Gimenez et al : entraînement en détonation du PA dans des mélanges HMX-liant actif-PA		 ASCII red (1996)
1998	1 ^{ère} nanoparticules d'Al dans les explosifs : D dépend de la taille de l'Al	P.J. Miller et al : effets de la taille des particules d'Al dans divers explosifs		Nouvelle limitation des modèles « CJ » et « (G)ZND »			
		G. Baudin et al : combustion de nanoparticules d'aluminium dans divers explosifs					

Année	Périodes historiques	Explosifs	Modélisations	Photos	Motivations	Moyens de calcul
1998			W.M. Howard, L. Fried & P.C. Souers : modèle Wood & Kirkwood dans un code thermochimique			
1999			P. Vidal, B.A. Khasainov, Problème de Cauchy Riemann aux chocs réactifs			
2001			A. Kapila, R. Menikoff, J. Bdzil, S. Son & D.S. Stewart : Modèle de Baer & Nunziato réduit à l'équilibre mécanique	 A. Kapila		
2004			A. Chinnayya, E. Daniel & R. Saurel Calcul ZND d'une détonation multiphasique NM & RDX-PA-AI-PBHT		Lever les limites des modèles « CJ » et « (G)ZND » observées pour les explosifs en présence de particules métalliques	 BGL
			V. Belsky et al : détonation de mélanges TNM-NB-AI & influence de la taille des particules d'Al & de la balance en oxygène sur la détonation			
2007			R. Saurel et al : relations de choc multiphasique à la limite des faibles compressions pour le modèle réduit de Kapila			 TERA 10 (2006)
			W.A. Trzcinski et al : caractéristiques de détonation de RDX-AI			
2008			M.F. Gogulya et al : Nano-composites Al-HMX, caractéristiques explosives			
			G. Baudin et al : validation du modèle Petitpas et al 2009 sur des mélanges TNM-NB-AI			
2009			F. Petitpas, et al : Conditions multiphasique CJ et calculs 2D			

Références bibliographiques

- ¹ N. Manson, Historique de la découverte de l'onde de détonation, *Journal de Physique, Colloque C4*, supplément au n° 9, tome 48, 1987.
- ² P.A. Bauer, E.K. Daboda, N. Manson, Chronology of early research on detonation wave, *Progress in Astronautics and Aeronautics*, AIAA Washington DC, 1991
- ³ F.A. Abel, Contribution to the history of explosive agents, *Phil. Trans.* 159, 1869, pp. 489-516 ; aussi *C.R. Ac. des Sc., Paris*, Vol. 69, 1869, pp. 105-121.
- ⁴ P. Berthelot, Sur la force des poudres et des matières explosives, *C.R. Ac. des Sc., Paris*, Vol. 71, 1870, pp. 619-625, 667-677, 709-728, et *Annales de Chimie et de Physique*, 4^{ème} Série, Vol. 23, 1871, pp. 223-273.
- ⁵ L.P. Roux, E. Sarrau, Expériences sur les effets de la dynamite, *C.R. Ac. des Sc., Paris*, Vol. 76, 1873, pp. 1089-1092.
- ⁶ F.A. Abel, Contribution to the history of explosive agents: second memoir, *Phil. Trans.* 164, 1874, pp. 337-395; aussi *C.R. Ac. des Sc., Paris*, Vol. 78, 1874, p. 1227, 1301, 1362, 1432-1436.
- ⁷ M. Berthelot, Sur la vitesse de propagation de la détonation dans les matières explosives solides et liquides, *C.R. Ac. des Sc., Paris*, Vol. 100, 1885, pp. 314-320 ; aussi *Ann. de Chim. et de Phys.*, 6^{ème} ser. 6, 1885, pp. 556-573.
- ⁸ M. Berthelot, Sur la propagation des phénomènes explosifs dans les gaz, *C.R. Ac. des Sc., Paris*, Vol. 93, 1881, pp. 223-273.
- ⁹ M. Berthelot, P. Vieille, Sur la propagation des phénomènes explosifs dans les gaz, *C.R. Ac. des Sc., Paris*, Vol. 94, 1882, p. 101 et P. 802.
- ¹⁰ E. Mallard, H. Le Chatelier, Sur les vitesses de propagation et l'inflammation dans les mélanges gazeux explosifs, *C.R. Ac. des Sc., Paris*, Vol. 93, 1881, pp. 145-148.
- ¹¹ E. Mallard, H. Le Chatelier, Recherches sur la combustion des mélanges gazeux explosifs, *Ann. des Mines*, 8^{ème} série, 4, 1883, p. 274.
- ¹² N. Manson, Contribution de Paul Vieille à la connaissance des détonations et des ondes de choc, *Scien. et Tchn. de l'Armement*, 60, n°232, 1986, pp. 26-59.
- ¹³ M. Berthelot, Sur l'onde explosive, *C.R. Ac. des Sc., Paris*, Vol. 94, 1882, pp. 149-152.
- ¹⁴ M. Berthelot, Sur l'onde explosive, sur les données caractéristiques de la détonation et sa vitesse de propagation dans les corps solides et liquides, et spécialement dans le nitrate de méthyle, *C.R. Ac. des Sc., Paris*, Vol. 112, 1891, pp. 16-27 ; aussi *Mem. des Poudres et Salpêtres*, 4, 1891, pp. 7-19.
- ¹⁵ H. Dixon, The rate of explosion in gases, *Phil. Trans. A*, 184, 1893, pp. 97-188.
- ¹⁶ H. Riemann, Traduction française des œuvres de Riemann par L. Laugel, Ed. Gauthier-Villars, Paris, 1898.
- ¹⁷ W.J. Rankine, On the thermodynamic theory of finite longitudinal disturbance, *Philos. Trans.*, 160, 1870, pp. 277-288.
- ¹⁸ H. Hugoniot, Propagation des mouvements dans les corps et spécialement dans les gaz parfaits, *Journ. de l'Ecole Polytechnique, Cahiers* 57 et 58, 1887-1889.
- ¹⁹ J. Hadamard, Leçons sur la propagation, 1903 (en téléchargement sur GALICA)
- ²⁰ V.A. Michelson, Sur la vitesse normale d'inflammation des mélanges gazeux explosifs (en russe), thèse soutenue à l'Université de Moscou en 1894, rééditée dans les *Œuvres Complètes*, en 1930 par *Novi Agronom. Moscou* (Nous n'avons pas pu l'obtenir).
- ²¹ D.L. Chapman, On the rate of explosion in gases, *Philos. Mag.* 47, 1889, pp. 90-104.
- ²² P. Vieille, Rôle des discontinuités dans la propagation des phénomènes explosifs, *C.R. Ac. des Sc., Paris*, Vol. 130, 1900, pp. 413-416 ; aussi *Mém. des Poudres et Salpêtres*, Paris, Vol. 10, 1899-1900, pp. 177-260.
- ²³ A.A. Grib, Hydrodynamic theory of explosive gas mixtures, Candidate's Dissertation in Phys-Math. Sci., Tomsk Univ., 1940 ; *Prikl. Mekh. Mat.*, 8, n° 4, p. 273, 1944.
- ²⁴ H.E. Bethe, The theory of shock waves for an arbitrary equation of state, Report OSRD n° 545, seriral n° 237, may, 4, 1942.
- ²⁵ S. Earnshaw, On the mathematical theory of sound, *Philos. Trans. of the Roy. Soc. London*, 150, 1860, pp. 133-148.
- ²⁶ Jones, Bower, *Journal of the Manchester Lit. and Phil. Soc.*, 1898.
- ²⁷ E. Jouguet, Sur l'onde explosive, *C.R. Ac. des Sc., Paris*, Vol. 139, 1904, pp. 121-124.
- ²⁸ E. Jouguet, Sur l'onde explosive - II. Influence de la dissociation, *C.R. Ac. des Sc., Paris*, Vol. 140, pp. 711-712.
- ²⁹ E. Jouguet, Sur la propagation des réactions chimiques dans les gaz, *Journ. des Math. Pures et Appl.*, Vol. 6, 1906, pp. 347-425.
- ³⁰ E. Jouguet, *Mécanique des Explosif*, Ed. Douin, 1917.

- ³¹ J. Taffanel, M. Dautriche, Sur la propagation de l'onde explosive dans les solides, C.R. Ac. des Sc., Paris, Vol. 125, 1912, pp. 1211.
- ³² R. Becker, Physikalische über feste und Gasformige sprengstoffe (La physique des explosifs solides et gazeux), Zeitschrift für Techn. Phys., 1922, pp. 152-159, 249-256 ; aussi Stosswelle und Detonation (Choc et détonation), Zeitschrift für Physik, 1922, pp. 321-362.
- ³³ R.I. Scoria, On the thermodynamic theory of detonation, Journal of Chem. Phys., Vol. 3, 1935, pp. 425-430.
- ³⁴ A. Schmidt, Über die detonation von sprengstoffen und die beziehungen zwischen dichte und detonationsgeschwindigkeit (Sur la detonation des explosifs et la relation entre la densité et la vitesse de détonation), Zeitschrift für Gesamte Schiess und Sprengstoffwesen, Vol. 30, 1936, pp. 8, 38, 80, 114, 148, 183, 218, 240, 284, 322.
- ³⁵ G.B. Kistiakovsky, E.B. Wilson, The hydrodynamic theory of detonation and shock waves, O.S.R.D. Rept. 114, 1941.
- ³⁶ C. Campbell, The propagation of explosion waves in gases contained in tubes of varying cross-section, J. of the Chem. Soc., 1922, pp. 2483-2498.
- ³⁷ E. Jones, Photographic study of detonation in solid explosives – Part I: the development of photographic method for measuring rates of detonation, Proceedings of the Roy. Soc. of London, Vol. 120, 1928, pp. 603-619.
- ³⁸ H. Jones, A theory of dependence of the rate of detonation of solid explosives and diameter of the charge, Proceedings of the Royal Society of London, Vol. A189, 1947, pp. 415-426.
- ³⁹ V. Rosing, J. Khariton, Prekrashtenie detonazi vzrivskatikh vesteshtv pri mlkh diametrov zariada (Extinction de la détonation des explosifs dans des charges de petit diameter), Doklady of the Acad. Of Sciences SSSR, Vol. 26, 1940, pp. 360-363.
- ⁴⁰ G.I. Taylor, The dynamics of combustion products behind plane and spherical detonation front in explosives, Proceedings of the Royal Society of London, Vol. A200, 1950, pp. 235-247.
- ⁴¹ L. Brun, Un nouveau modèle macroscopique de la détonation non soutenue dans les explosifs condensés, Hautes Pressions Dynamiques, 1989, pp. 103-107.
- ⁴² S.G. Andreev et al, Physique des Explosions, Ed. Phizmatlit, , ISBN 5-9221-0219-2, Tome 1, 2002.
- ⁴³ M.J. Kamlet, S.J. Jacobs, Chemistry of detonations – I. A simple method of calculating detonation properties of C-H-N-O explosives, J. Chem. Phys., Vol. 48, n° 1, 1968, pp. 23-35
- ⁴⁴ O. Heuzé, P. Bauer, A simple method for the calculation of the detonation properties of C-H-N-O explosives, Hautes Pressions Dynamiques, 1989, pp. 225-232.
- ⁴⁵ G. Baudin, QUERCY, un code thermo-chimique adapté au calcul des caractéristiques de détonation des explosifs aluminisés, 5^{ème} Congrès de Pyrotechnique EUROPYRO, 1993.
- ⁴⁶ M.H. Kshavarz, H. Motamedoshariti, R. Moghayadnia, H.R. Nazari, J. Azarniamehraban, A new computer code to evaluate detonation performance of high explosives and their thermochemical properties, part I, article in press in Journal of Hazardous Materials, 2009.
- ⁴⁷ E.L. Lee, H.C. Horning, W. Kury, Adiabatic expansion of high explosives detonation products, Lawrence Radiation Laboratory, Un. Of Aliforny, Livermore, TID 4500 – UCRL 50422, 1968.
- ⁴⁸ R. Karlsch, La bombe d'Hitler, Calman-Lévy.
- ⁴⁹ Ja. B. Zeldovitch, K teorii rasprostraneniya detonazi v gasoobrasnikh sistemakh (Sur la théorie de la propagation de la détonation dans les systèmes gazeux), Zhurnal Experimentalnoi i Teoretiskoi Fiziki (en Russe), Vol. 10, n° 5, 1940, p. 542-565.
- ⁵⁰ J. Von Neumann, Theory of stationary detonation waves, O.S.R.D. Rept. N° 549, 1942., Selected works, T. 6, Ed. Mac Millan N.Y.
- ⁵¹ W. Döring, Detonationvorgänge in gasen, Ann. De Phys., 43, 1943, pp. 421-436.
- ⁵² Ja. B. Zeldovitch, O raspredelenii davleniia i skorosti v produktakh detonazionovo vzriva v tashastnosti pri sferitsheskom rasprostraneni detonazionoi volnu (Sur la pression et la vitesse dans les produits de détonation et plus spécialement dans ceux d'une onde de détonation sphérique), Zhurnal Experimentalnoi i Teoretiskoi Fiziki (en Russe), SSSR, Vol. 12, 1942, pp. 389-406.
- ⁵³ H. Jones, A theory of dependence of the rate of detonation of solid explosives on diameter of the charge, Proc. of the Roy. Soc. of London, Vol. A189, 1947, pp. 415-426.
- ⁵⁴ H. Eyring, R.E. Powell, C.H. Duffey, R.B. Paril, The stability of detonation, Chem. Rev., Vol. 45, 1949, pp. 69-181.
- ⁵⁵ W.W. Wood, J.W. Kirkwood, Diameter effect in condensed explosives : the relation between velocity and radius curvature, J. of Chem. Phys., Vol. 22, 1954, pp. 1920-1924.
- ⁵⁶ S.K. Chan, A theory to predict the velocity-diameter relation of explosives, Symposium High Pressure Dynamics, 1978, pp. 326-334.
- ⁵⁷ J.B. Bdzil, Steady-state two-dimensional detonation, J. Fluid. Mech., Vol. 108, 1981, pp. 195-226.

- ⁵⁸ J.B. Bdzil, D.S. Stewart, Modeling of two-dimensional detonation with detonation shock dynamics, *J. of Physics of Fluids, A*, Vol. 1, n° 7, 1988, p. 1261; aussi, D.S. Stewart, J.B. Bdzil, A lecture on detonation shock dynamics, *Mathematical modeling in combustion science*, Lecture Notes in Physics, Vol. 249, Springer-Verlag Publishers, 1988, pp. 17-30.
- ⁵⁹ C.M. Tarver, Ph. D. Thesis, Johns Hopkins University, Naltimore, MD, 1973 ; *Combust. Flame* 46, 1982, p. 111, p. 135, p. 157.
- ⁶⁰ A.F. Belyaev, *Combustion, detonation and work of explosion of condensed systems*, M. Nauka, 1968 (in Russian).
- ⁶¹ M.A. Cook, *The science of high explosives*, Reinhold Publishing Corporation, New-York, Chapman & Hall, LTD.London, 1959.
- ⁶² C.L. Mader, *Nuerical modeling of detonations*, Los Alamos Series in Basic and Applied Sciences, University of California Press, 1979.
- ⁶³ R.R. McGuire, D.L. Ornellas, F.H. Helm, C.L. Coon, M. Finger, Detonation chemistry: an interpretation of fluorine as an oxidizing moiety in explosives, *Proc. 7th Int. Symp on Det.*, 1981, pp. 940-951.
- ⁶⁴ M. Cowperthwaite, Non-ideal detonation in a composite CHNO explosive conaining aluminum, *Proc. 10th Int. Det. Symp.*, 1993, pp. 656-664.
- ⁶⁵ M. Finger, H.C. Forming, E.L. Lee, J.W. Kury, Metal acceleration by composite explosive, *5th Int. Symp. On Det.*, 1970, p. 137.
- ⁶⁶ R.H. Guirgis, P.J. Miller, Time-dependent equations of state for aluminized underwater explosives, *Proc. 10th Int. Det. Symp.*, 1993, pp. 675-682.
- ⁶⁷ W.S. Tao, C.M. Tarver, J.W. Kury, C.G. Lee, D.L. Ornellas, Understanding composite explosive energetics: IV. Reactive flow modeling of aluminum reaction kinetics in PETN and TNT using normalized product equation of state, *Proc. 10th Int. Det. Symp.*, 1993, pp. 628-636.
- ⁶⁸ G. Baudin, D. Bergues, A reaction model for aluminized PBX applied to underwater explosion calculations, , *Proc. 10th Int. Det. Symp.*, 1993, pp. 646-655.
- ⁶⁹ D.L. Kennedy, D.A. Jones, Modeling shock initiation and detonation in the non-ideal explosive PBXW-115, , *Proc. 10th Int. Det. Symp.*, 1993, pp. 665-674.
- ⁷⁰ B.C. Beard, C.S. Coffey, R.A. Brizzolara, Nanophase aluminum for potential applications in improved explosives, *Technical Digest*, September 1993, PP. 95-101.
- ⁷¹ P.J. Miller, C.D. Beford, Effect of metal particle size on the detonation properties of various metalized explosives, *11th Int. Det. Symp.*, 1998.
- ⁷² G. Baudin, A. Lefrançois, D. Bergues, J. Bigot, Y. Champion, Combustion of nanophase aluminum in the detonation products of nitromethane and TNT, *11th Int. Det. Symp.*, 1998.
- ⁷³ M.F. Gogulya, M.N. Makhov, M.A. Brazhnikov, A. Yu. Dolgoborodov, V.I. Arkhipov, A.N. Zhigach, I.O. Leipunskii, M.L. Kuskov, Explosive characteristics of aluminized HMX-based nanocomposites. *Combution, Explosion and Shock Waves*, Vol. 44, n° 2, 2008, pp. 198-212.
- ⁷⁴ M.R. Baer, J.W. Nunziato, A two-phase mixture theory for the deflagration-to-detonation trabsition (DDT) in reactive granular materials, *Int. J. of Multiphase Flows*, Vol. 12, 1986, pp. 861-889.
- ⁷⁵ J.M. Powers, D.S. Stewart, H. Krier, Two-phase steady detonation analysis, *11th Int. Coll. on Dynamics of explosions and reactive systems*, 1987, pp.341-361; *Theory of two phase detonation-Part I: Modeling*, *Comb. and Flame*, vol. 80, 1990, pp. 264-279; *Theory of two-phase detonation – Par II: Structure*, *Comb. and Flame*, vol. 80, 1990, pp. 280-303.
- ⁷⁶ A. Kapila, R. Menikoff, J. Bdzil, S. Son, D.S. Stewart, Two-phase modeling of DDT in granular materials : reduced esuations, *Physics of Fluids*, Vol. 13, 2000, pp. 463-472.
- ⁷⁷ R. Abgrall, R. Saurel, Discrete equations for multiphase mixtures, *J. Comp. Phys.*, Vol. 186, n° 2, 2003, pp. 361-396.
- ⁷⁸ A. Chinnayya, E. Daniel, R. Saurel, Modelling of detonation waves in heterogeneous energetic materials, *J. Comp. Physics*, Vol. 196, n° 2, 2004, pp. 490-538.
- ⁷⁹ R. Saurel, O. Le Metayer, J. Massoni, S. Gavrilyuk, Shock jump relations for multiphase mixtures with stiff mechanical relaxation, *Shock Waves*, Vol. 16, 2007, pp. 209-232.
- ⁸⁰ F. Petitepas, R. Saurel, E. Franquet, A. Chinnayya, Modelling detonation waves in condensed energetic materials: multiphase CJ conditions and multidimensional computations, *Shock Waves*, 17 July 2009, on line.
- ⁸¹ G. Baudin, R. Saurel, E. Daniel, E. Franquet, O. Lemetayer, J. Massoni, V. Belsky, E. Zotov, Toward a thermal non-equilibrium multi-phase model for HE containing metallic particles, *New Models dans Hydrocodes*, Lisbon, 2008, choisi pour être publié dans *J. of Energetic Materials*, 2010; aussi A multiphase model for heterogeneous explosives containing liquids and aluminum particles, *EUROPYRO*, Beaune, 1997.

⁸² P.A. Bauer, E.K. Dabora, N. Manson, Chronology of early research on detonation waves, Progress in Astronautics and Aeronautics, AIAA, Washington DC, n° 133, 1991, pp. 3-18.

⁸³ N. Manson, E.K. Dabora, Chronology of research on detonation waves : 1920-1950, Progress in Astronautics and Aeronautics, AIAA, Washington DC, n° 153, 1993, pp. 3-39.

⁸⁴ O. Heuzé, SCCM, APS, 2009, en cours de publication.