C. R. Acad. Sci. Paris, t. 323, Série I, p. 1207-1212, 1996
Problèmes mathématiques de la mécanique/*Mathematical Problems in Mechanics*

Les mélanges gazeux réactifs. (II) Stabilité asymptotique des états d'équilibre

Vincent GIOVANGIGLI et Marc MASSOT

Centre de Mathématiques Appliquées, École Polytechnique, 91128 Palaiseau CEDEX, France.
E-mail : giovangi@cmapx.polytechnique.fr et massot@cmapx.polytechnique.fr

Résumé. Nous considérons un système quasi-linéaire du second ordre avec terme source, autour d'un état stationnaire constant. En supposant l'existence d'une entropie, l'invariance du noyau associé aux matrices de dissipation, des conditions de stabilité pour le terme source et de dissipativité des équations linéarisées autour de l'état d'équilibre, nous démontrons l'existence globale d'une solution régulière au problème de Cauchy et la stabilité asymptotique de l'état d'équilibre. Nous obtenons également des estimations de décroissance pour toute dimension d'espace. Nous appliquons ces résultats au système d'équations régissant les mélanges gazeux réactifs dont la cinétique chimique est complexe.

Multicomponent reactive flows. (II) Asymptotic stability of equilibrium states

Abstract. *We investigate an abstract second order system of conservation laws with a source term, around a constant stationnary state. Assuming the existence of a generalized entropy function, the invariance of the nullspace naturally associated with dissipation matrices, stability conditions for the source term and a dissipative structure for the linearized equations around the constant equilibrium state, we establish global existence of a smooth solution and asymptotic stability of the equilibrium state without restriction on the space dimension and obtain decay estimates. We finally apply these results to the system of equations governing multicomponent reactive flows with complex chemistry.*

Abridged English Version

We investigate an abstract second order hyperbolic–parabolic system of conservation laws with a source term (1). We denote by ∂_t the time derivative operator, U the conservative variable, ∂_i the space derivative operator in the ith direction, $C = \{1, \ldots, d\}$ the indexing set of spatial coordinates, $d \in \{1, 2, 3\}$ the space dimension, F_i the convective flux in the ith direction, G_{ij}, $i, j \in C$, the dissipation matrices and Ω the source term [4].

Note présentée par Pierre-Arnaud RAVIART.

Assuming the smoothness of the coefficients (H_1) and the existence of a generalized entropy function $\mathcal{H}$ (H_2), the system can be symmetrized (2) by using the entropic variables $V = (\partial_U \mathcal{H})^t$. Assuming then the invariance of the nullspace $N\big(\widetilde{B}(V,w)\big)$ naturally associated with dissipation matrices (H_3), we can recast the symmetric system into a normal form, that is in the form of a symmetric composite hyperbolic-parabolic system (3) by using a normal variable.

We then investigate the behavior of the system around a constant equilibrium state (H_4). To this purpose, we assume a dissipative structure for linearized equations around the constant equilibrium state (H_5), (H_6) and local stability conditions for the source term (H_7), (H_8). In particular, we assume that the source term lies in the range of its derivative at equilibrium and that the entropy production due to chemical reactions is nonnegative. Under these assumptions, we establish in theorems 1 and 2 global existence of a smooth solution to the Cauchy problem (4) and asymptotic stability of the equilibrium state [4]. The hyperbolic and parabolic components of the solution solution satisfy (5) and the estimates (6). We further obtain decay estimates (7) of the solution towards the equilibrium state. These results generalize those of Kawashima obtained for a dimension greater or equal to three [5].

Note that the existence of compensating matrices K_j, $j \in C$, implies that the eigenvalues of the linearized system have a negative real part. Conversely, the latter assumption only implies the existence of a combined compensating function $K(w)$ such as in remark 3. Nevertheless, the existence of a combined compensating matrix is sufficient in order to establish theorems 1 and 2. In addition, in practical applications, it is usually possible to find compensating matrices K_j, $j \in C$, and to define $K(w) = \sum_{j\in C} K_j w_j$, $w \in \mathcal{S}^{d-1}$, where $\mathcal{S}^{d-1}$ is the sphere in dimension d.

We then apply these results to the system of equations governing multicomponent reactive flows derived from the kinetic theory of dilute polyatomic reactive gas mixtures [1]. Relying on the first part of this study ([2], [3]), this system admits a generalized entropy function and can be recast into a normal form, that is, a symmetric hyperbolic–parabolic form of the system.

A detailed study of the source term provided by the kinetic theory (9), (10) arising from an arbitrary complex chemical network (8), and associated with Maxwellian distributions, allows us to establish the existence of constant stationnary states in proposition 4 and that the required properties (H_1)-(H_8) hold. As a result, we prove global existence of a smooth bounded solution, asymptotic stability of the equilibrium state, and decay estimates for multicomponent reactive flows.

Nous considérons un système quasi-linéaire du second ordre avec un terme source sous la forme

$$\partial_t U + \sum_{i\in C} \partial_i F_i(U) = \sum_{i,j\in C} \partial_i\Big(G_{ij}(U)\partial_j U\Big) \;+\; \Omega(U), \tag{1}$$

où ∂_t est l'opérateur de dérivation temporelle, U la variable conservative, ∂_i l'opérateur de dérivation spatiale dans la i-ième direction, $C = \{1,\dots,d\}$ l'ensemble des indices des coordonnées spatiales, $d \in \{1,2,3\}$ la dimension d'espace, F_i le flux convectif dans la i-ième direction, G_{ij}, $i,j \in C$, les matrices de dissipation et Ω le terme source [4]. La variable U varie dans un ouvert convexe $\mathcal{O}_U$ de $\mathbb{R}^n$ et nous supposons que

(H_1) Les flux convectifs F_i, $i \in C$, les matrices de dissipation G_{ij}, $i,j \in C$, et le terme source Ω, sont des fonctions régulières de la variable $U \in \mathcal{O}_U$.

(H_2) Le système admet une entropie généralisée $\mathcal{H}$ sur $\mathcal{O}_U$, c'est-à-dire compatible avec les flux convectifs et dissipatifs [3].

Les variables entropiques $V = (\partial_U \mathcal{H})^t$ définissent alors un difféomorphisme $U \to V$ régulier de l'ouvert convexe $\mathcal{O}_U$ sur un ouvert $\mathcal{O}_V$, et par changement de variable, on obtient le système symétrique ([2], [3], [6])

$$\widetilde{A}_0(V)\partial_t V + \sum_{i\in C} \widetilde{A}_i(V)\partial_i V = \sum_{i,j\in C} \partial_i\Big(\widetilde{G}_{ij}(V)\partial_j V\Big) + \widetilde{\Omega}(V), \tag{2}$$

où $\widetilde{A}_0 = \partial_V U$, $\widetilde{A}_i = (\partial_U F_i)\,\widetilde{A}_0$, $\widetilde{G}_{ij} = G_{ij}\widetilde{A}_0$, et $\widetilde{\Omega} = \Omega$. La matrice $\widetilde{A}_0$ est symétrique définie positive, les matrices $\widetilde{A}_i$, $i \in C$, sont symétriques, on a $\widetilde{G}_{ij}^t = \widetilde{G}_{ji}$, $i,j \in C$ et la matrice $\widetilde{B}(V,w) = \sum_{i,j\in C} \widetilde{G}_{ij}(V) w_i w_j$ est symétrique semi-définie positive pour $V \in \mathcal{O}_V$ et $w \in \mathcal{S}^{d-1}$, où $\mathcal{S}^{d-1}$ est la sphère unité en dimension d. Nous supposons alors la propriété d'invariance fondamentale

(H_3) Le noyau de la matrice

$$\widetilde{B}(V,w) = \sum_{i,j\in C} \widetilde{G}_{ij}(V) w_i w_j,$$

ne dépend ni de $V \in \mathcal{O}_V$, ni de $w \in \mathcal{S}^{d-1}$. On désignera par n_0 sa dimension.

On établit alors l'existence de variables normales W telles que $V \to W$ soit un difféomorphisme de $\mathcal{O}_V$ sur un ouvert $\mathcal{O}_W$ et telles que le système obtenu par changement de variable dans (2) et après multiplication par $(\partial_W V)^t$

$$\overline{A}_0(W)\partial_t W + \sum_{i\in C} \overline{A}_i(W)\partial_i W = \sum_{i,j\in C} \partial_i\big(\overline{G}_{ij}(W)\partial_j W\big) + \overline{H}(W, \partial_x W_{II}) + \overline{\Omega}(W), \tag{3}$$

soit sous forme normale. Plus précisément, la matrice $\overline{A}_0$ est symétrique définie positive, $\overline{A}_i$, $i \in C$, sont symétriques, on a $\overline{G}_{ij}^t = \overline{G}_{ji}$, $i,j \in C$. De plus, pour la décomposition $\mathbb{R}^n = \mathbb{R}^{n_0} \times \mathbb{R}^{n-n_0}$, les matrices $\overline{A}_0$ et $\overline{G}_{ij}$ ont la structure diagonale par bloc

$$\overline{A}_0 = \begin{pmatrix} \overline{A}_0^{I,I} & 0 \\ 0 & \overline{A}_0^{II,II} \end{pmatrix}, \qquad \overline{G}_{ij} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \overline{G}_{ij}^{II,II} \end{pmatrix},$$

et la matrice $\overline{B}^{II,II}(W,w) = \sum_{i,j\in C} \overline{G}_{ij}^{II,II}(W) w_i w_j$ est définie positive pour $W \in \mathcal{O}_W$ et $w \in \mathcal{S}^{d-1}$. On se rapportera à [2], [3] pour plus de détails sur les formes normales. On suppose alors qu'il existe un état stationnaire constant pour notre système

(H_4) Il existe un état d'équilibre constant $U^e \in \mathcal{O}_U$ tel que

$$\Omega(U^e) = 0, \qquad \widetilde{\Omega}(V^e) = 0, \qquad \overline{\Omega}(W^e) = 0,$$

où l'on a noté $V^e = V(U^e) \in \mathcal{O}_V$ et $W^e = W(U^e) \in \mathcal{O}_W$, et on va s'intéresser à la stabilité asymptotique de l'état d'équilibre. A cette fin, il nous faut compléter les hypothèses précédentes (H_1)-(H_4) par des hypothèses (H_5)-(H_6) sur la structure dissipative de la forme normale linéarisée autour de l'état stationnaire W^e. Selon Kawashima, nous supposons tout d'abord que

(H_5) La matrice $\overline{A}_0(W^e)$ est symétrique définie positive, les matrices $\overline{A}_i(W^e)$, $i \in C$, sont symétriques, on a $\overline{G}_{ij}(W^e)^t = \overline{G}_{ji}(W^e)$, $i,j \in C$, et la linéarisée du terme source au point stationnaire $\overline{L}(W^e) = -\partial_W \overline{\Omega}(W^e)$ est symétrique semi-définie positive,

(H_6) Il existe des matrices de compensation K^j, $j \in C$, telles que les produits $K^j \overline{A}_0(W^e)$, $j \in C$, soient anti-symétriques, et telles que la matrice

$$\sum_{i,j\in C} \frac{1}{2}\Big(K^j \overline{A}_i(W^e) + \big(K^j \overline{A}_i(W^e)\big)^t\Big) w_i w_j + \sum_{i,j\in C} \overline{G}_{ij}(W^e) w_i w_j + \overline{L}(W^e),$$

soit définie positive pour $w \in S^{d-1}$.

Nous supposons également que le terme source est toujours dans l'image de sa différentielle à l'équilibre (H_7) et que la production d'entropie due aux terme source est positive (H_8).

(H_7) Le plus petit espace contenant le terme source $\widetilde{\Omega}(V) = \Omega(U(V))$, pour tout $V \in \mathcal{O}_V$, est inclus dans l'image de $\widetilde{L}(V^e) = -(\partial_V \widetilde{\Omega})(V^e)$.

(H_8) Il existe un voisinage de V^e dans $\mathcal{O}_V$ et une constante positive c tels que pour tout V dans ce voisinage, on ait la propriété de coercivité locale

$$c\,\big|\widetilde{\Omega}(V)\big|^2 \le -\langle V - V^e, \widetilde{\Omega}(V)\rangle.$$

Nous pouvons alors énoncer un théorème d'existence globale et de stabilité asymptotique de l'état d'équilibre, ainsi qu'un théorème portant sur des estimations de décroissance de la solution vers l'équilibre.

THÉORÈME 1. – *Soit un système de lois de conservation* (1) *vérifiant les propriétés* (H_1)-(H_6) *et* (H_8). *Soient des entiers $d \ge 1$, $l \ge [d/2]+2$ et une condition initiale $W^0(x)$ telle que $\|W^0 - W^e\|_{l,2}$ soit suffisamment petit où $\|\ \|_{k,p}$ désigne la norme de l'espace de Sobolev classique $W_p^k(\mathbb{R}^d)$. Alors il existe une solution globale au problème de Cauchy*

$$(4)\qquad \begin{cases} \overline{A}_0 \partial_t W + \displaystyle\sum_{i\in C} \overline{A}_i \partial_i W = \sum_{i,j\in C} \partial_i\Big(\overline{G}_{ij} \partial_j W\Big) + \overline{H} + \overline{\Omega}, \\ W(0,x) = W^0(x), \end{cases}$$

telle que

$$(5)\qquad \begin{cases} W_I - W_I^e \in C^0\big([0,\infty); W_2^l(\mathbb{R}^d)\big) \cap C^1\big([0,\infty); W_2^{l-1}(\mathbb{R}^d)\big) \cap L^2(0,\infty; W_2^l(\mathbb{R}^d)), \\ W_{II} - W_{II}^e \in C^0\big([0,\infty); W_2^l(\mathbb{R}^d)\big) \cap C^1\big([0,\infty); W_2^{l-2}(\mathbb{R}^d)\big) \cap L^2(0,\infty; W_2^{l+1}(\mathbb{R}^d)), \end{cases}$$

où $W = (W_I, W_{II})^t$, $W_I \in \mathbb{R}^{n_0}$, $W_{II} \in \mathbb{R}^{n-n_0}$. Cette solution W vérifie l'estimation

$$(6)\qquad \|W(t) - W^e\|_{l,2}^2 + \int_0^t \|\partial_x W_I(\tau)\|_{l-1,2}^2\, d\tau + \int_0^t \|\partial_x W_{II}(\tau)\|_{l,2}^2\, d\tau \le C\|W^0 - W^e\|_{l,2}^2;$$

et $\sup_{\mathbb{R}^d} |W(t) - W^e|$ tend vers zéro lorsque $t \to \infty$.

THÉORÈME 2. – *Soit un système de lois de conservation* (1) *vérifiant les propriétés* (H_1)-(H_8). *Soit $d \ge 1$, $l \ge [d/2]+3$ et supposons la condition initiale $W^0(x)$ telle que $\|W^0 - W^e\|_{l,2}$ soit suffisamment petit. Le problème de Cauchy admet alors une solution globale unique d'après le Théorème 1.*

Supposons alors que $W^0 - W^e \in W_2^l(\mathbb{R}^d) \cap L^p(\mathbb{R}^d)$, où $p = 1$, si $d = 1$, et $p \in [1,2)$, si $d \ge 2$. Alors, si $\|W^0 - W^e\|_{l,2} + \|W^0 - W^e\|_{0,p}$ est suffisamment petit, la solution globale unique du problème de Cauchy vérifie l'estimation de décroissance

$$(7)\qquad \|W(t) - W^e\|_{l-2,2} \le C(1+t)^{-\gamma}\Big(\|W^0 - W^e\|_{l-2,2} + \|W^0 - W^e\|_{0,p}\Big),$$

pour $t \in [0,\infty)$, où C est une constante positive et où $\gamma = d \times (1/2p - 1/4)$.

Les démonstrations de ces deux théorèmes se trouvent dans [4] et [7]. Ces résultats généralisent ceux obtenus par Kawashima pour une dimension supérieure ou égale à trois [5].

Remarque 3. – L'existence des matrices de compensation K^j, $j \in C$, implique que les valeurs propres des équations normales linéarisées ont des parties réelles strictement négatives [8]. Réciproquement, si ces valeurs propres ont des parties réelles strictement négatives, alors il existe une matrice de compensation glogale $K(w)$, définie pour $w \in \mathcal{S}^{d-1}$, telle que $w \to K(w)$ est C^∞, $K(w)$ est réelle, le produit $K(w)\,\overline{A}_0(W^e)$ est anti-symétrique, $K(-w) = -K(w)$, pour $w \in \mathcal{S}^{d-1}$, et telle que

$$\sum_{j\in C} \frac{1}{2}\Big(K(w)\,\overline{A}_j(W^e) + \big(K(w)\,\overline{A}_j(W^e)\big)^t\Big)w_j + \overline{B}(W^e, w) + \overline{L}(W^e),$$

soit définie positive sur $\mathcal{S}^{d-1}$. On ne sait pas par contre si $K(w)$ est de la forme $\sum_{j\in C} K^j w_j$ [8]. Néanmoins, les théorèmes 1 et 2 restent vrais si l'on suppose seulement l'existence de la matrice $K(w)$, $w \in \mathcal{S}^{d-1}$. Dans la pratique, toutefois, il est généralement possible de trouver des matrices de compensation K^j, $j \in C$, et de définir $K(w) = \sum_{j\in C} K^j w_j$.

Nous allons appliquer les résultats précédents au système d'équations décrivant les mélanges gazeux réactifs dont la cinétique chimique est complexe. Le système d'équations correspondant a été étudié dans [2], [3]. En particulier, il possède une entropie généralisée, et par passage aux variables entropiques V, une forme symétrique conservative, ainsi qu'un ensemble de formes normales ([2], [3]). Pour la forme normale simplifée considérée dans [2], [3], on obtient ainsi les propriétés (H_1)-(H_3). Il reste alors à établir que les hypothèses sur le terme source (H_4), (H_7) et (H_8) et sur le système linéarisé autour de l'état stationnaire (H_5) et (H_6) sont vérifiées.

La cinétique chimique en jeu est une cinétique à n_R réactions réversibles impliquant les n_S espèces

$$\sum_{k\in S} \nu'_{ki}\mathcal{S}_k \rightleftharpoons \sum_{k\in S} \nu''_{ki}\mathcal{S}_k, \qquad i \in R, \tag{8}$$

où $\mathcal{S}_k$ est le symbole chimique de la k-ième espèce, ν'_{ki} et ν''_{ki} les coefficients stœchiométriques de la k-ième espèce dans la i-ième réaction, et $R = [1, n_R]$ l'ensemble des indices des réactions. Le terme source s'écrit sous la forme

$$\Omega = (m_1\omega_1, \ldots, m_{n_S}\omega_{n_S}, 0, 0, 0, 0)^t, \tag{9}$$

où m_k est la masse molaire de la k-ième espèce et ω_k, le taux de production de la k-ième espèce. Ce taux est donné par

$$\omega_k = \sum_{i\in R} \nu_{ki}\tau_i, \tag{10}$$

où $\nu_{ki} = \nu''_{ki} - \nu'_{ki}$, $i \in R$, $k \in S$, et où τ_i est le taux d'avancement molaire de la i-ième réaction [4]. Il est important de noter que ce terme source est celui obtenu à partir de la théorie cinétique avec des distributions Maxwelliennes et qu'il est donc compatible avec la loi d'action de masse [1]. L'existence d'un état stationnaire constant découle alors directement de la forme du terme source ([4], [7]). En désignant par ϱ le vecteur $\varrho = (\rho_1, \ldots, \rho_{n_S})^t$, on a la proposition suivante.

PROPOSITION 4. – *Etant donnée une température $T^e \in (0, \infty)$, et $\varrho_c \in (0, \infty)^{n_S}$, il existe un unique point d'équilibre constant U^e, avec $v^e = 0$ et $\varrho^e - \varrho_c \in \mathcal{M}$ où*

$$\mathcal{M} = \mathit{Vect}\{\, (m_1\nu_{1i}, \ldots, m_{n_S}\nu_{n_S i})^t, \quad i \in R\,\}. \tag{11}$$

Les propriétés (H_4)-(H_5) *et* (H_7)-(H_8) *sont alors vérifiées.*

Il nous reste alors à considérer la dissipativité du système sous forme normale linéarisée à l'équilibre, ce qui fait l'objet de la proposition suivante [4].

PROPOSITION 5. – *Pour* $\alpha \in \mathbb{R}_+$ *suffisamment petit, les matrices* K^i, $i \in C$, *définies par*

$$\sum_{i\in C} K^i \xi_i = \alpha \begin{pmatrix} 0 & 0 & \xi^t & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\xi & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \left(\overline{A}_0(W^e)\right)^{-1}, \tag{12}$$

où $\xi = (\xi_1, \xi_2, \xi_3)^t$*, satisfont la propriété* (H_6).

Les résultats abstraits des théorèmes 1 et 2 peuvent donc s'appliquer aux mélanges gazeux réactifs. Les équations correspondantes, sous l'ensemble des hypothèses dérivées de la théorie cinétique, admettent donc une solution globale unique autour d'un état d'équilibre chimique stationnaire. Cet état est asymptotiquement stable et l'on a des estimations de décroissance. Nous renvoyons à [4] pour l'énoncé précis de ce théorème ainsi que pour les démonstrations.

Note remise le 22 août 1996, acceptée le 16 septembre 1996.

Références bibliographiques

[1] **Ern A. et Giovangigli V., 1994**. *Multicomponent Transport Algorithms*, Lectures Notes in Phys., Springer Verlag, m24.

[2] **Giovangigli V. et Massot M., 1996**. Les mélanges gazeux réactifs, (I) Symétrisation et existence locale, *C. R. Acad. Sci. Paris*, 323, série I, p. 1153-1158.

[3] **Giovangigli V. et Massot M., 1996**. Multicomponent Reacting Flows, (I) Symmetrization and Local Existence (à paraître).

[4] **Giovangigli V. et Massot M., 1996**. Multicomponent Reacting Flows, (II) Asymptotic Stability of Equilibrium States (à paraître).

[5] **Kawashima S., 1984**. Systems of hyperbolic-parabolic composite type, with application to the equations of magnetohydrodynamics, *Doctoral Thesis*, Kyoto University.

[6] **Kawashima S. et Shizuta Y., 1988**. On the Normal Form of the Symmetric Hyperbolic-Parabolic Systems associated with the Conservation Laws, *Tôhoku Math. J.*, 40, p. 449-464.

[7] **Massot M., 1996**. Modélisation Mathématique et Numérique de la Combustion des Mélanges Gazeux, *Thèse de Doctorat*, Ecole Polytechnique.

[8] **Shizuta Y. et Kawashima S., 1985**. Systems of equations of hyperbolic-parabolic type with applications to the discrete Boltzmann equation, *Hokkaido Math. J.*, 14, p. 249-275.