C. R. Acad. Sci. Paris, t. 323, Série I, p. 1153-1158, 1996
Problèmes mathématiques de la mécanique//*Mathematical Problems in Mechanics*

Les mélanges gazeux réactifs. (I) Symétrisation et existence locale

Vincent GIOVANGIGLI et Marc MASSOT

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

Résumé. Nous considérons les équations régissant les mélanges gazeux réactifs dont la cinétique chimique est complexe. Ces équations sont issues de la théorie cinétique des mélanges gazeux dilués polyatomiques réactifs. A l'aide d'une entropie, nous obtenons une forme symétrique conservative du système. Dans le cadre de la théorie de Kawashima et Shizuta, le système obtenu est alors mis sous une forme normale, *i.e.*, sous la forme d'un système symétrique hyperbolique-parabolique. Nous caractérisons également toutes les formes normales pour ce système de lois de conservation. En utilisant un résultat de Vol'pert et Hudjaev, nous démontrons ensuite l'existence locale et l'unicité d'une solution régulière bornée pour le problème de Cauchy.

Multicomponent reactive flows. (I) Symmetrization and local existence

Abstract. *We consider the equations governing multicomponent reactive flows derived from the kinetic theory of dilute polyatomic reactive gas mixtures. Using an entropy function, we derive a symmetric conservative form of the system. In the framework of Kawashima and Shizuta's theory, we recast the resulting system into a normal form, that is, in the form of a symmetric hyperbolic-parabolic composite system. We also characterize all normal forms for this system of conservation laws. Using a result of Vol'pert and Hudjaev, we then prove the local existence of a bounded smooth solution to the Cauchy problem.*

Abridged English Version

We consider the equations governing multicomponent reactive flows. These equations are rigorously derived from the kinetic theory of dilute polyatomic reactive gas mixtures [2]. This derivation yields the conservation equations, the thermo-chemistry properties and the transport fluxes ([2], [4]).

The conservation equations are given by (1), where ∂_t is the time derivative operator, U the conservative variable (2), ∂_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

Note présentée par Pierre-Arnaud RAVIART.

ith direction (3), $\mathcal{F}_i$ the diffusive flux in the ith direction (4) and Ω the source term [4]. The diffusive fluxes (4) are expressed in terms of the diffusion velocities (5), the pressure tensor (6) and the heat flux (7). The kinetic theory provides, in particular, naturally symmetric transport coefficients by using the formalism introduced by Waldmann and Trübenbacher [11] which differs from the one considered by Monchick, Yun and Mason [9] where symmetry has been artificially destroyed ([2], [3]).

Relying on the work of Kawashima and Shizuta [7] on symmetrizability of dissipative systems of conservation laws, which generalizes previous works on symmetric hyperbolic systems, the resulting quasilinear system (8) is symmetrized (10), (11) by using the entropic variables (9) [4]. A fundamental property is then that the nullspace $N(\widetilde{B})$ naturally associated with the symmetrized dissipation matrices is invariant. Note that using the transport fluxes from [9] prevents complete symmetrization and leads to compatibility problems with Onsager reciprocal relations ([1], [3]).

We then investigate normal forms of the system, that is, symmetric hyperbolic–parabolic composite forms (13), (14). Thanks to the invariance property of $N(\widetilde{B})$, it is possible to characterize all normal variables (12) associated with normal forms (13), (14), (15) of the system ([4,] [7]). In particular, the system of multicomponent reacting flows can be recast into a normal form by using the natural normal variable (16). A simpler normal form, however, is obtained by using the normal variable (17), and generalizes the normal form of the Navier-Stokes equations obtained by Kawashima ans Shizuta ([4], [7]). Complete expressions for the symmetric and normal forms of the system of multicomponent reactive flows are to be found in [4], [8].

We then investigate the well posedness of the Cauchy problem by using a simplified quasilinear version of an existence theorem proved by Vol'pert and Hudjaev concerning symmetric hyperbolic-parabolic systems ([8], [10]). The solutions are investigated in the space V_l defined by the norm (18), where l is an integer such that $l > d/2 + 3$. Using the simplified normal form obtained previously, we prove local existence and uniqueness, in the space V_l, for the Cauchy problem (19), (20) associated with multicomponent reactive flows governing equations. The solution satisfies the estimates (21)-(23) and can also be continued unless the quantity (24) explodes or the solution reaches the boundary of the admissible domain.

In a subsequent paper, we investigate global existence and asymptotic stability of constant equilibrium states ([5], [6]).

On s'intéresse aux équations régissant les mélanges gazeux réactifs dont la cinétique chimique est complexe. Ces équations sont issues de la théorie cinétique des mélanges gazeux dilués polyatomiques réactifs [2]. Elles se présentent sous la forme d'équations de conservation, de relations thermo-chimiques et de relations de transport. Les équations de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie s'écrivent sous la forme

$$\partial_t U + \sum_{i\in C} \partial_i F_i + \sum_{i\in C} \partial_i \mathcal{F}_i = \Omega, \tag{1}$$

où ∂_t est l'opérateur de dérivation temporelle, U la variable conservative, ∂_i l'opérateur de dérivation spatiale dans la i-ième direction, $C = \{1, \ldots, d\}$ 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, $\mathcal{F}_i$ le flux dissipatif dans la i-ième direction et Ω le terme source [4]. La variable U s'écrit sous la forme

$$U = (\rho_1, \ldots, \rho_{n_S}, \rho v_1, \ldots, \rho v_d, \rho e^{\mathrm{tot}})^t, \tag{2}$$

où ρ_k désigne la densité de la k-ième espèce, $\rho = \sum_{k\in S} \rho_k$ la densité totale, $S = [1, n_S]$ l'ensemble des indices des espèces, v_i la composante de la vitesse moyenne massique dans la i-ième direction et

e^{tot} l'énergie spécifique totale. Les flux convectifs F_i, $i \in C$, sont donnés par

$$F_i = (\rho_1 v_i, \ldots, \rho_{n_S} v_i, \rho v_1 v_i + \delta_{i1} p, \ldots, \rho v_d v_i + \delta_{id} p, \rho e^{\mathrm{tot}} v_i + p v_i)^t, \tag{3}$$

où δ_{ij} le symbole de Kronecker et p la pression thermodynamique. Enfin, les flux dissipatifs $\mathcal{F}_i$, $i \in C$, s'écrivent sous la forme

$$\mathcal{F}_i = (\rho_1 \mathcal{V}_{1i}, \ldots, \rho_{n_S} \mathcal{V}_{n_S i}, \Pi_{i1}, \ldots, \Pi_{id}, q_i + \sum_{j \in C} \Pi_{ij} v_j)^t, \tag{4}$$

où $\mathcal{V}_{ki}$ la vitesse de diffusion de la k-ième espèce dans la i-ième direction, Π le tenseur des contraintes de viscosité et q_i le flux de chaleur dans la i-ième direction.

Pour un développement de Enskog au premier ordre, les flux de transport $\mathcal{V}_k$, $k \in S$, Π et q s'expriment linéairement en fonction des gradients des grandeurs macroscopiques au moyen des coefficients de transport par les relations

$$\mathcal{V}_k = -\sum_{l \in S} D_{kl}(\partial_x X_l + X_l \partial_x \log p) - \theta_k \partial_x \log T, \qquad k \in S, \tag{5}$$

$$\Pi = -\left(\kappa - \frac{2}{3}\eta\right)(\partial_x \cdot v) I - \eta\big(\partial_x v + (\partial_x v)^t\big), \tag{6}$$

$$q = -\lambda' \partial_x T - p \sum_{k \in S} \theta_k (\partial_x X_k + X_k \partial_x \log p) + \sum_{k \in S} \rho_k h_k \mathcal{V}_k, \tag{7}$$

où D_{kl} est la matrice de diffusion multi-espèces, X_k la fraction molaire de la k-ième espèce, θ_k le coefficient de diffusion thermique de la k-ième espèce, T la température absolue, η la viscosité de cisaillement, κ la viscosité volumique, I le tenseur identité, λ' la conductivité thermique partielle et h_k l'enthalpie spécifique de la k-ième espèce. Les diverses grandeurs thermo-chimiques comme la pression, l'energie interne ou encore les taux de production chimiques sont d'autre part des fonctions régulières de la variable d'état U [4].

Le formalisme utilisé pour la dérivation de ces équations a été introduit par Waldmann et Trübenbacher [11] et généralisé aux mélanges réactifs par Ern et Giovangigli [2]. Il permet d'obtenir les propriétés de symétrie « naturelles » et de positivité pour les flux de transport, contrairement à Monchick, Yun et Mason [9], qui ont artificiellement détruit cette symétrie. En particulier, la matrice de diffusion multi-espèces D_{kl} est symétrique semi-définie positive, les coefficients η et λ' sont strictement positifs et κ est positif. Enfin, ces équations sont obtenues dans le régime des réactions tempérées pour lequel les temps caractéristiques de la chimie sont plus longs que les temps de libre parcours moyens des molécules et que les temps de relaxation des degrés d'énergie interne des molécules [2].

En introduisant les matrices jacobiennes $A_i(U) = \partial_U F_i$, $i \in C$, et les matrices de dissipation G_{ij}, $i, j \in C$, avec $\mathcal{F}_i = -\sum_{j \in C} G_{ij}(U) \partial_j U$, $i \in C$, on obtient le système quasi-linéaire

$$\partial_t U + \sum_{i \in C} A_i(U) \partial_i U = \sum_{i,j \in C} \partial_i (G_{ij}(U) \partial_j U) + \Omega(U). \tag{8}$$

Ces matrices sont définies et régulières sur un ouvert convexe $\mathcal{O}_U \subset \mathbb{R}^n$, $n = n_S + d + 1$ [4]. En utilisant les résultats de Kawashima et Shizuta [7] sur la symétrisabilité des systèmes de lois de conservation avec termes dissipatifs, qui généralisent les travaux antérieurs sur les systèmes hyperboliques, nous obtenons une forme symétrique conservative de notre système ([4], [8]).

PROPOSITION 1. – *Soit $\mathcal{H} = -\rho s$, où s est la densité d'entropie (physique), et $V = (\partial_U \mathcal{H})^t$ les variables entropiques correspondantes. Alors V est donnée par*

$$V = (\partial_U \mathcal{H})^t = \frac{1}{T}\left(\mu_1 - \frac{1}{2}v\cdot v, \ldots, \mu_{n_S} - \frac{1}{2}v\cdot v, v_1, \ldots, v_d, -1\right)^t, \tag{9}$$

où μ_k est le potentiel chimique de la k-ième espèce et $U \to V$ est un difféomorphisme C^∞ de $\mathcal{O}_U$ sur l'ouvert $\mathcal{O}_V = \mathbb{R}^{n-1} \times (-\infty, -1/T_r)$ où T_r est une température de référence. De plus, les équations correspondantes s'écrivent

$$\widetilde{A}_0 \partial_t V + \sum_{i\in C} \widetilde{A}_i \partial_i V = \sum_{i,j\in C} \partial_i \left(\widetilde{G}_{ij} \partial_j V\right) + \widetilde{\Omega}, \tag{10}$$

avec

$$\widetilde{A}_0 = \partial_V U, \qquad \widetilde{A}_i = (\partial_U F_i)\widetilde{A}_0, \qquad \widetilde{G}_{ij} = G_{ij}\widetilde{A}_0, \qquad \widetilde{\Omega} = \Omega. \tag{11}$$

La matrice $\widetilde{A}_0(V)$ est symétrique définie positive, les matrices $\widetilde{A}_i(V)$, $i \in C$, sont symétriques, on a les relations $\widetilde{G}_{ij}(V)^t = \widetilde{G}_{ji}(V)$, $i, j \in C$, et $\widetilde{B}(V, w) = \sum_{i,j\in C} \widetilde{G}_{ij}(V) w_i w_j$ est symétrique semi-définie positive pour w dans la sphère S^{d-1} et V dans $\mathcal{O}_V$.

Il est à noter que les expressions des flux de transport provenant de [9] ne permettent pas de parvenir à une forme symétrique explicite et conduisent à des problèmes de compatibilité avec les relations de réciprocité de Onsager ([1], [3]).

Le système symétrique obtenu reste cependant intermédiaire entre un système hyperbolique de lois de conservation et un système fortement parabolique. Nous voulons le réécrire sous une forme normale, c'est-à-dire sous la forme d'un système symétrique composite hyperbolique-parabolique, où l'on sépare les variables hyperboliques et les variables fortement paraboliques [7]. Nous utilisons, à cette fin, une caractérisation complète des formes normales des systèmes dont le noyau $N(\widetilde{B}(V, w))$ est invariant, c'est-à-dire indépendant de $V \in \mathcal{O}_V$ et $w \in S^{d-1}$ [4]. Après avoir établi l'invariance du noyau de $\widetilde{B}$ dans le cas particulier des mélanges gazeux réactifs, on obtient le théorème suivant.

THÉORÈME 2. – *Pour toute forme normale du système des mélanges gazeux réactifs, obtenue par un changement de variable $V \longmapsto Z$ de $\mathcal{O}_V$ sur $\mathcal{O}_Z$, en multipliant (8) à gauche par $\partial_Z V^t$, la variable Z est de la forme*

$$Z = (Z_I, Z_{II})^t = \left(\varphi_I(\rho), \varphi_{II}\left(\frac{\mu_2 - \mu_1}{T}, \ldots, \frac{\mu_{n_S} - \mu_1}{T}, \frac{v_1}{T}, \ldots, \frac{v_d}{T}, \frac{-1}{T}\right)\right)^t, \tag{12}$$

où I correspond à la première composante, II aux $n_S + d$ dernières, et où φ_I et φ_{II} sont deux difféomorphismes dans $\mathbb{R}$ et $\mathbb{R}^{n_S+d}$, respectivement. Le système résultant s'écrit alors

$$\overline{A}_0^{I,I} \partial_t Z_I + \sum_{i\in C} \overline{A}_i^{I,I} \partial_i Z_I + \sum_{i\in C} \overline{A}_i^{I,II} \partial_i Z_{II} = 0, \tag{13}$$

$$\overline{A}_0^{II,II} \partial_t Z_{II} + \sum_{i\in C} \overline{A}_i^{II,I} \partial_i Z_I + \sum_{i\in C} \overline{A}_i^{II,II} \partial_i Z_{II} = \sum_{i,j\in C} \partial_i (\overline{G}_{ij}^{II,II} \partial_j Z_{II}) + \overline{\Omega}_{II} + \overline{H}_{II}, \tag{14}$$

avec

$$\left\{ \begin{aligned} &\overline{A}_0 = \partial_Z V^t \widetilde{A}_0 \partial_Z V, && \overline{G}_{ij} = \partial_Z V^t \widetilde{G}_{ij} \partial_Z V, \\ &\overline{A}_i = \partial_Z V^t \widetilde{A}_i \partial_Z V, && \overline{H} = -\sum_{i,j\in C} \partial_i(\partial_Z V^t)[\widetilde{G}_{ij} \partial_Z V] \partial_j Z, \qquad \overline{\Omega} = \partial_Z V^t \widetilde{\Omega}. \end{aligned} \right. \tag{15}$$

La matrice $\overline{A}_0$ est symétrique définie positive, les matrices $\overline{A}_i$, $i \in C$, sont symétriques, on a $\overline{G}_{ij} = \overline{G}_{ji}^t$, $i, j \in C$, et la matrice $\overline{B} = \sum_{i,j\in C} \overline{G}_{ij}^{II,II} w_i w_j$ est définie positive pour tout $Z \in \mathcal{O}_Z$ et $w \in \mathcal{S}^{d-1}$. On appelle alors Z_I la composante hyperbolique et Z_{II} les composantes fortement paraboliques. Enfin, lorsque φ_{II} est une application linéaire constante, on a également $\overline{H}_{II} = 0$.

Diverses formes normales sont obtenues explicitement dans [4] et [8], en particulier la forme normale « naturelle » obtenue en prenant l'identité pour φ_I et φ_{II}, et associée à la variable normale

$$\widehat{W} = \left(\rho, \frac{\mu_2-\mu_1}{T}, \ldots, \frac{\mu_{n_S}-\mu_1}{T}, \frac{v_1}{T}, \ldots, \frac{v_d}{T}, \frac{-1}{T}\right)^t, \tag{16}$$

et la forme normale « simplifiée » associée à la variable

$$W = \left(\rho, \log\left(\frac{\rho_2^{r_2}}{\rho_1^{r_1}}\right), \ldots, \log\left(\frac{\rho_{n_S}^{r_{n_S}}}{\rho_1^{r_1}}\right), v_1, \ldots, v_d, T\right)^t, \tag{17}$$

qui varie dans l'ouvert convexe $\mathcal{O}_W = (0, \infty) \times \mathbb{R}^{n_S-1} \times \mathbb{R}^d \times (T_r, \infty)$, où r_k désigne la constante spécifique du k-ième gaz. La forme normale obtenue avec la variable W généralise celle obtenue par Kawashima et Shizuta dans [7]. Ces formes normales peuvent être utilisées pour la résolution du problème de Cauchy localement en temps et pour l'étude de la stabilité asymptotique des états d'équilibre constants ([5], [6]).

En nous appuyant sur les travaux de Vol'pert et Hudjaev [10] sur les systèmes symétriques composites hyperboliques-paraboliques, nous démontrons alors un théorème d'existence et unicité de solutions régulières pour le problème de Cauchy avec conditions initiales régulières. Nous utilisons, à cet effet, les espaces $V_l(\mathbb{R}^d)$, définis par la norme [10]

$$\|\phi\|_l^2 = \sum_{i\in[1,n]} \|\phi_i\|_l^2, \qquad \|\phi_i\|_l = |\phi_i|_{0,\infty} + \sum_{k\in[1,l]} |\phi_i|_{k,2}, \tag{18}$$

où $\phi = (\phi_1, \ldots, \phi_n)^t$ et où $|\phi_i|_{k,p}$ désigne la semi-norme classique de l'espace de Sobolev $W_p^k(\mathbb{R}^d)$.

THÉORÈME 3. – *Considérons le problème de Cauchy pour le système sous forme normale*

$$\begin{cases} \overline{A}_0 \partial_t W + \sum_{i\in C} \overline{A}_i \partial_i W = \sum_{i,j\in C} \partial_i(\overline{G}_{ij}\partial_j W) + \overline{H} + \overline{\Omega}, \\ W(0,x) = W^0(x), \end{cases} \tag{19}$$

avec

$$W^0 \in V_l(\mathbb{R}^d), \qquad \inf_{\mathbb{R}^d} \rho^0(x) > 0, \qquad \inf_{\mathbb{R}^d} T^0(x) > T_r. \tag{20}$$

Alors il existe t_0, $0 < t_0 < \infty$ tel que (19) *admette une solution unique $W = (W_I, W_{II})^t \in \mathcal{O}_W$ dans la bande $\overline{Q}_{t_0} = [0, t_0] \times \mathbb{R}^d$, continue sur $\overline{Q}_{t_0}$ ainsi que ses dérivées du premier ordre en temps et du second ordre en espace, et pour laquelle les inégalités suivantes soient vérifiées*

$$\sup_{0\le t\le t_0} \left(\|\rho(t)\|_l + \sum_{k\in[2,n_S]} \|\log(\rho_k^{r_k}/\rho_1^{r_1})(t)\|_l + \sum_{i\in C} \|v_i(t)\|_l + \|T(t)\|_l \right) < +\infty, \tag{21}$$

$$\inf_{\overline{Q}_{t_0}} \rho(t,x) > 0, \qquad \inf_{\overline{Q}_{t_0}} T(t,x) > T_r, \qquad \sup_{0\le t\le t_0} \|\partial_t \rho(t)\|_{l-1} < +\infty, \tag{22}$$

$$(23) \qquad \int_0^{t_0} \Big(\sum_{k\in[2,n_S]} \|\partial_t \log(\rho_k^{r_k}/\rho_1^{r_1})(\tau)\|_{l-1}^2 + \sum_{i\in C} \|\partial_t v_i(\tau)\|_{l-1}^2 + \|\partial_t T(\tau)\|_{l-1}^2$$
$$+ \sum_{k\in[2,n_S]} \|\log(\rho_k^{r_k}/\rho_1^{r_1})(\tau)\|_{l+1}^2 + \sum_{i\in C} \|v_i(\tau)\|_{l+1}^2 + \|T(\tau)\|_{l+1}^2 \Big) d\tau < +\infty.$$

De plus, ou bien $t_0 = +\infty$ ou bien il existe t_1 tel que le théorème soit valide pour tout $t_0 < t_1$ et tel que, pour $t_0 \to t_1^-$, la quantité

$$(24) \qquad \|\rho(t_0)\|_{1,\infty} + \sum_{k\in[2,n_S]} \|\log(\rho_k^{r_k}/\rho_1^{r_1})(t_0)\|_{2,\infty} + \sum_{i\in C} \|v_i(t_0)\|_{2,\infty} + \|T(t_0)\|_{2,\infty},$$

explose ou $\inf_{\overline{Q}_{t_0}} T \to T_r$.

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

Références bibliographiques

[1] **Chalot F., Hughes T. J. R. et Shakib F., 1990.** Symmetrization of Conservation Laws with Entropy for High-Temperature Hypersonic Computations, *Comput. Systems Eng.*, n^{os} 2-4, p. 495-521.

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

[3] **Giovangigli V., 1991.** Convergent Iterative Methods for Multicomponent Diffusion, *Impact Comput. Sci. Engrg.*, 3, p. 244-276.

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

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

[6] **Giovangigli V. et Massot M., 1996.** Les mélanges gazeux réactifs, (II). Stabilité asymptotique des états d'équilibre, *C. R. Acad. Sci. Paris*, 323, série I (à paraître).

[7] **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.

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

[9] **Monchick L., Yun K. S. et Mason E. A., 1963.** Formal Kinetic Theory of Transport Phenomena in Polyatomic Gas Mixtures, *J. Chem. Phys.*, 39, p. 654-669.

[10] **Vol'pert A. I. et Hudjaev S. I., 1972.** On the Cauchy Problem for Composite Systems of Nonlinear Differential Equations, *Math. USSR Sb.*, 16, p. 517-544.

[11] **Waldmann L. et Trübenbacher E., 1962.** Formale Kinetische Theorie von Gasgemischen aus anregbaren Molekülen, *Z. Naturforschg.*, 17a, p. 363-376.