Un modèle de diffusion gazeuse dans les voies respiratoires distales

Laurent Boudin

Univ. Pierre et Marie Curie Paris-VI & INRIA

Séminaire de mathématiques appliquées, Collège de France
14 janvier 2011

Collaborations avec

Dario Götz (Tech. Univ. Darmstadt)
Bérénice Grec (Univ. Paris Descartes)
Francesco Salvarani (Univ. Pavia)

Aperçu de l'exposé

1. Un mélange gazeux dans le poumon
2. L'expérience de Duncan et Toor
3. Les équations de Maxwell-Stefan
   - Présentation du modèle
   - Mélange à trois espèces
4. La limite d'un modèle cinétique
   - Contexte mathématique
   - Noyaux de collision, propriétés
   - Limite de diffusion

Aperçu de l'exposé

Compositions de l'air

Air = mélange gazeux à plusieurs composants, principalement :

	azote (N_2)	oxygène (O_2)	eau (H_2O)	dioxyde de carbone (CO_2)
atmosphérique (sec)	78%	21%	0%	0%
pulmonaire (humide) av. éch. gazeux	74,3%	19,5%	6,2%	0%
pulmonaire (humide) apr. éch. gazeux	74,3%	14,2%	6,2%	5,3%

Modèles d'écoulement de l'air dans le poumon

Schéma descriptif des voies aériennes

- Générations 1–7 : régime principalement convectif $\longrightarrow$ Navier-Stokes
- Générations 8–14 : régime mixte
- Générations 15–23 : régime principalement diffusif $\longrightarrow$ quel modèle ?

Hypothèse dans les voies distales :
convection négligée $\Longrightarrow$ régime *purement* diffusif

Échanges gazeux dans l'alvéole

De nombreux schémas décrivant les échanges gazeux avec le sang depuis l'alvéole sont disponibles en ligne.

Diffusion pilotée par les pressions partielles en O_2 et CO_2

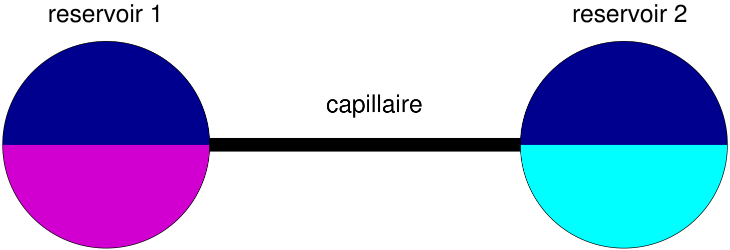
Aperçu de l'exposé

Description de l'expérience

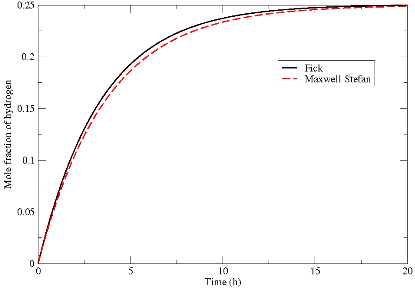
Mélange de trois gaz parfaits : dioxyde de carbone, azote, hydrogène

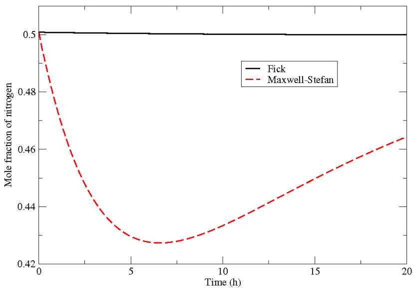
Réservoir n° 1 :
CO_2 (50%) et N_2 (50%)

Réservoir n° 2 :
H_2 (50%) et N_2 (50%)

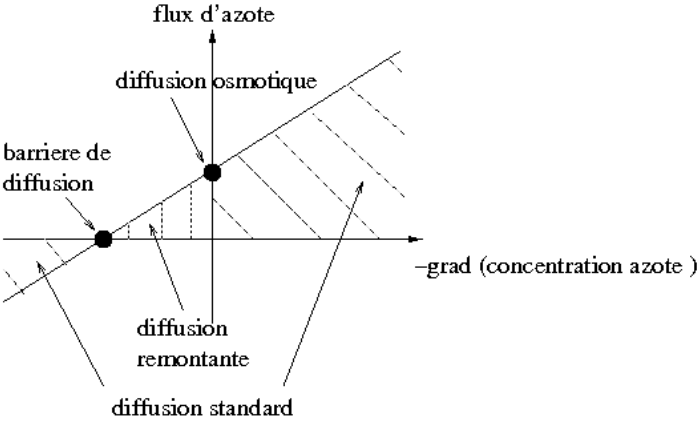


Phénomènes de diffusion étranges





Plusieurs types de diffusion



Aperçu de l'exposé

Aperçu de l'exposé

Équations de Maxwell-Stefan

Mélange de $I \geq 2$ espèces dans $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ ouvert borné de bord régulier
Espèce i : concentration c_i – fraction molaire ξ_i – flux molaire N_i

- Système fermé et régime purement diffusif $\Rightarrow$ diffusion équimolaire : $\sum_i N_i = 0$ et $C := \sum_i c_i$ constante
- Système fermé $\Rightarrow$ $N_{i|\partial\Omega} = 0$
- Conservation de la masse $\partial_t \xi_i + \nabla_x \cdot N_i = 0$
- Loi de Maxwell-Stefan $-\nabla_x \xi_i = \dfrac{1}{C} \sum_{j \neq i} \dfrac{\xi_j N_i - \xi_i N_j}{D_{ij}}$

  à comparer avec la loi de Fick $-D_i \nabla_x \xi_i = N_i$,

  D_{ij} coeff. de diffusion binaires, D_i coeff. de diffusion effectifs

Dérivation en 1D

Krishna, Wesselingh. *Chem. Eng. Sci.* 52, 1997

- Hypothèse des gaz parfaits
- Équilibre entre forces de pression et de friction
- Force de pression molaire de l'espèce i : $-\frac{RT}{c_i}\partial_x c_i$
- Forces de friction molaire de l'espèce j sur i : $\frac{RT}{D_{ij}}\xi_j(u_i - u_j)$
- Relation d'équilibre

$$-\frac{1}{c_i}\partial_x c_i = \sum_{j \neq i} \frac{1}{D_{ij}} \xi_j (u_i - u_j)$$

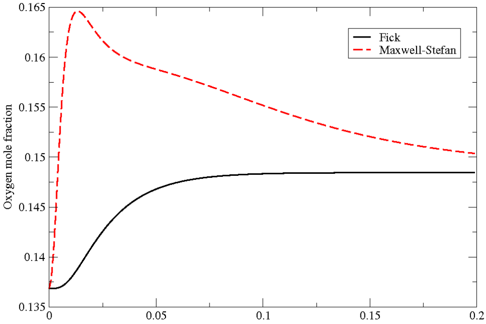
- Lien flux / vitesse molaire : $N_i = C\xi_i u_i$

Maxwell-Stefan vs. Fick dans le poumon

- Modèles pertinents pour l'air dans un poumon sain
- Air $\rightarrow$ heliox / oxhel := hélium (79%) + oxygène (21%) pour BPCO (emphysème, bronchite chronique)
- Voies proximales : pas d'effet inflammatoire de l'hélium
- Voies distales : absorption d'oxygène améliorée

Voir

- Thiriet *et al. Bull. Eur. Physiopathol. Respir.* 15, 1979
- Chang. *Fed. Proc.* 39, 1980



Contexte mathématique

Beaucoup de littérature en physique mais
peu de contributions mathématiques à notre connaissance, sauf

- Giovangigli. *Multicomponent flow modeling*, Birkhäuser, 1999
- Bothe. *Proc. Conf. Nonlinear Parabolic Problems*, à paraître

Aperçu de l'exposé

Forme réduite du système

Inconnues ξ_1, N_1, ξ_2, N_2

$$
\begin{aligned}
\partial_t \xi_i + \nabla_x \cdot N_i &= 0 \qquad\qquad 1 \le i \le 2 \\
\frac{1}{D_{13}} N_1 + \alpha N_1 \xi_2 - \alpha N_2 \xi_1 &= -\nabla_x \xi_1 \\
\frac{1}{D_{23}} N_2 - \beta N_1 \xi_2 + \beta N_2 \xi_1 &= -\nabla_x \xi_2
\end{aligned}
$$

avec

$$
\alpha = \frac{1}{D_{12}} - \frac{1}{D_{13}}, \qquad \beta = \frac{1}{D_{12}} - \frac{1}{D_{23}}
$$

Pour l'espèce 3 : $\xi_3 = 1 - \xi_1 - \xi_2$, $N_3 = -N_1 - N_2$

Convergence vers l'équilibre en temps grand

Théorème ($\alpha = 0$)

Soient $\xi_1^{\text{in}}, \xi_2^{\text{in}}\ L^\infty(\Omega)$ positives telles que $\xi_1^{\text{in}} + \xi_2^{\text{in}} \leq 1$.

- Existence et unicité des solutions régulières $\forall t \geq 0$
- $\xi_1 \geq 0$, $\xi_2 \geq 0$
- $\|\xi_1(t,\cdot)\|_{L^1} = \|\xi_1^{\text{in}}\|_{L^1}$, $\|\xi_2(t,\cdot)\|_{L^1} = \|\xi_2^{\text{in}}\|_{L^1}$, $\forall t \geq 0$
- $(\xi_i) \to \bar{\xi}_i := \dfrac{\|\xi_i^{\text{in}}\|_{L^1}}{|\Omega|}$ quand $t \to +\infty$
- Pour $\theta \in]0,1[$, il existe $K_\theta \geq 0$ telle que, si on pose

$$E(t) = \frac{K_\theta}{2} \int_\Omega (\xi_1 - \bar{\xi}_1)^2 \, dx + \frac{1}{2} \int_\Omega (\xi_2 - \bar{\xi}_2)^2 \, dx,$$

alors $E(t) \leq E(0) \exp\left(-2\theta \min(D_{12}, D_{23})\ C_{d,\Omega} t\right)$, où $C_{d,\Omega}$ est la meilleure constante pour l'inégalité de Poincaré sur Ω.

Convergence vers l'équilibre – éléments de preuve

- $m = \min(D_{12}, D_{23})$, $M = \max(D_{12}, D_{23})$
- Équation de la chaleur sur $\xi_1 \Longrightarrow$

$$\frac{1}{2}\frac{d}{dt}\int_\Omega (\xi_1 - \bar{\xi}_1)^2\, dx \leq -D_{12}\int_\Omega |\nabla \xi_1|^2\, dx$$

- Pour ξ_2 :

$$\frac{1}{2}\frac{d}{dt}\int_\Omega (\xi_2 - \bar{\xi}_2)^2\, dx \leq -\int_\Omega \gamma |\nabla \xi_2|^2\, dx - \beta D_{12}\int_\Omega \gamma \nabla \xi_1 \cdot \nabla \xi_2\, dx$$

avec $\gamma = \left(\dfrac{1}{D_{23}} + \beta \xi_1\right)^{-1} \in [m, M]$

- On conclut en utilisant $ab \leq \varepsilon a^2 + b^2/4\varepsilon$ pour tout $\varepsilon > 0$.

Un peu d'analyse numérique, $d = 1$

Hypothèse : $D_{23} \geq D_{13} \geq D_{12}$, i.e. $\alpha,\ \beta \geq 0$

- Subdivision régulière $(x_j := j\Delta x)_{0\leq j\leq J}$ de $\Omega = (0,1)$
- ξ_i estimée en $x_{j+1/2} := (j+1/2)\Delta x$
- N_i estimé en x_j

Pour $\Delta t > 0$ et $i \in \{1,2\}$, on considère les approximations suivantes

$$
\begin{aligned}
\xi_i^{(k,j)} &\simeq \xi_i(k\Delta t, x_{j+1/2}), && k\in\mathbb{N},\quad 0\leq j\leq J-1,\\
N_i^{(k,j)} &\simeq N_i(k\Delta t, x_j), && k\in\mathbb{N},\quad 0\leq j\leq J,\\
\xi_i^{(k,j-1/2)} &= \frac{1}{2}\left(\xi_i^{(k,j)} + \xi_i^{(k,j-1)}\right), && k\in\mathbb{N},\quad 1\leq j\leq J.
\end{aligned}
$$

Schéma aux différences finies

Paramètre de diffusion $\sigma = \Delta t / \Delta x^2$

- Conservation de l'espèce i

$$\xi_i^{(k+1,j)} = \xi_i^{(k,j)} - \sigma \left[N_i^{(k,j+1)} \Delta x - N_i^{(k,j)} \Delta x \right]$$

- Maxwell-Stefan $\longrightarrow$ système linéaire d'inconnues $N_1^{(k,j)} \Delta x$, $N_2^{(k,j)} \Delta x$

$$\begin{aligned} \left[\frac{1}{D_{13}} + \alpha \xi_2^{(k,j-1/2)} \right] N_1^{(k,j)} - \alpha \xi_1^{(k,j-1/2)} N_2^{(k,j)} &= \frac{\xi_1^{(k,j-1)} - \xi_1^{(k,j)}}{\Delta x} \\ -\beta \xi_2^{(k,j-1/2)} N_1^{(k,j)} + \left[\frac{1}{D_{23}} + \beta \xi_1^{(k,j-1/2)} \right] N_2^{(k,j)} &= \frac{\xi_2^{(k,j-1)} - \xi_2^{(k,j)}}{\Delta x} \end{aligned}$$

Propriétés du schéma

Proposition (conservation de la masse totale de chaque espèce)

$$\sum_j \xi_i^{(k+1,j)} = \sum_j \xi_i^{(k,j)} + \sigma \sum_j \Delta x \left[N_i^{(k,j)} - N_i^{(k,j+1)} \right] = \sum_j \xi_i^{(k,j)}$$

Proposition (consistence, stabilité si $D_{13} = D_{12}$)

- Schéma d'ordre 1 en temps et 2 en espace
- Schéma stable L^∞ si $\sigma D_{23} \leq 1/2$

Immédiat pour ξ_1 car solution de l'équation de la chaleur

Quand $\alpha \neq 0$, le schéma semble rester stable sous la même condition.

Preuve de la stabilité – lemme

On introduit

$$A(u,v) = \sigma D_{23} \frac{2+\beta D_{12}(u-v)}{2+\beta D_{23}(u+v)}, \qquad \forall\, u,v \in [0,1].$$

On vérifie

$$\begin{aligned}
\frac{\partial A}{\partial u} &= -2\beta D_{23}\sigma \frac{(D_{23}-D_{12})(1-v)}{[2+\beta D_{23}(u+v)]^2} \leq 0,\\
\frac{\partial A}{\partial v} &= -2\beta D_{23}\sigma \frac{(D_{23}+D_{12})+(D_{23}-D_{12})u}{[2+\beta D_{23}(u+v)]^2} \leq 0.
\end{aligned}$$

et on obtient

$$\sigma D_{12} \leq A(u,v) \leq \sigma D_{23}, \qquad \forall\, u,v \in [0,1].$$

Preuve de la stabilité – fin

- $X = \xi_1^{(k,j-1)}$, $Y = \xi_1^{(k,j)}$, $Z = \xi_1^{(k,j+1)} \in [0,1]$
- Schéma pour ξ_2 :

$$\xi_2^{(k+1,j)} = (1 - A(Y,Z) - A(Y,X))\xi_2^{(k,j)} + A(Z,Y)\xi_2^{(k,j+1)} + A(X,Y)\xi_2^{(k,j-1)}$$

- $\Rightarrow \xi_2^{(k+1,j)} \geq 0$ sous la condition de stabilité
- Récurrence sur $k \in \mathbb{N}$: $\xi_1^{(k,j)} + \xi_2^{(k,j)} \leq 1$

$$\Rightarrow \xi_1^{(k+1,j)} + \xi_2^{(k+1,j)} \leq F(X,Y,Z) \equiv 1\,!$$

alors que

$$\begin{aligned} F(X,Y,Z) = (1 - 2\sigma D_{12})Y + \sigma D_{12}(X+Z) \\ + (1 - A(Y,Z) - A(Y,X))(1-Y) \\ + A(Z,Y)(1-Z) + A(X,Y)(1-X) \end{aligned}$$

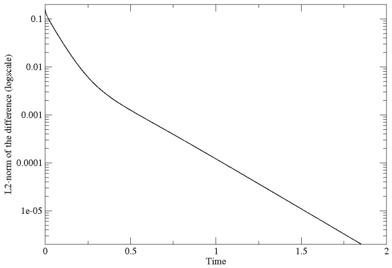
Convergence numérique vers l'équilibre

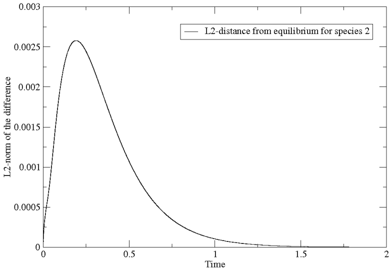
Cas général (coeff. binaires distincts, Duncan et Toor)

$D_{12} = 0,833$, $D_{13} = 0,680$, $D_{23} = 0,168$

Condition initiale :

$$\xi_1^{\text{in}}(x) = \begin{cases} 0,8 & \text{si } 0 \leq x < 0,5 \\ 0 & \text{si } 0,5 \leq x \leq 1 \end{cases} \quad \text{et} \quad \xi_2^{\text{in}}(x) = 0{,}2, \quad \forall\, x \in \Omega$$





Évolution de E et $\|\xi_2 - \bar{\xi}_2\|_{L^2}^2$ en fonction de t

Aperçu de l'exposé

1. Un mélange gazeux dans le poumon
2. L'expérience de Duncan et Toor
3. Les équations de Maxwell-Stefan
   - Présentation du modèle
   - Mélange à trois espèces
4. La limite d'un modèle cinétique
   - Contexte mathématique
   - Noyaux de collision, propriétés
   - Limite de diffusion

Aperçu de l'exposé

Contexte mathématique

- Sixième problème de Hilbert : « (...) Boltzmann's work on the principles of mechanics suggests the problem of developing mathematically the limiting processes (...) which lead from the atomistic view to the laws of motion of continua »

- Une seule espèce, pas de mélange

Bardos, Golse, Levermore. *C. R. Acad. Sci.* 309, 1989 ; *J. Statist. Phys.* 63, 1991 ; *Comm. Pure Appl. Math.* 46, 1993

Golse, Saint-Raymond. *Invent. Math.* 155, 2004

- Mélange, avec ou sans réaction chimique

Sirovich. *Phys. Fluids* 5, 1962

Desvillettes, Monaco, Salvarani. *Eur. J. Mech. B* 24, 2005

Modélisation cinétique

- Pas de réaction chimique, interactions mécaniques
- Fonction de densité de nombre normalisée f_i
  dépendant de $t \geq 0$, $x \in \mathbb{R}^d$, $v \in \mathbb{R}^d$
- $\xi_i(t,x) = \displaystyle\int_{v \in \mathbb{R}^d} f_i(t,x,v)\, dv$
  concentrations et fractions molaires égales ($C = 1$)
- Masse d'une molécule de l'espèce i : m_i
- Collisions microscopiques (m_i, v') et (m_j, v'_*) $\mapsto$ (m_i, v) et (m_j, v_*), obtenues par conservation de la quantité de mouvement et de l'énergie

$$\begin{aligned} v' &= \frac{1}{m_i + m_j}(m_i v + m_j v_* + m_j |v - v_*|\, \omega) \\ v'_* &= \frac{1}{m_i + m_j}(m_i v + m_j v_* - m_i |v - v_*|\, \omega) \end{aligned}$$

où $\omega \in S^{d-1}$

Aperçu de l'exposé

Noyaux de collision

- Noyaux mono-espèces

$$Q_i^{\mathrm{m}}(f,f)(v) = \int_{v_*\in\mathbb{R}^d}\int_{\omega\in S^{d-1}} B_i(v,v_*,\omega)\,\left[f(v')f(v'_*) - f(v)f(v_*)\right]\,dv_*\,d\omega$$

Hyp. de microréversibilité : $B_i(v,v_*,\omega) = B_i(v_*,v,\omega) = B_i(v',v'_*,\omega)$

- Noyaux bi-espèces, $i \neq j$

$$Q_{ij}^{\mathrm{b}}(f,g)(v) = \int_{v_*\in\mathbb{R}^d}\int_{\omega\in S^{d-1}} B_{ij}(v,v_*,\omega)\,\left[f(v')g(v'_*) - f(v)g(v_*)\right]\,dv_*\,d\omega$$

Hyp. de microréversibilité : $B_{ij}(v,v_*,\omega) = B_{ji}(v_*,v,\omega) = B_{ij}(v',v'_*,\omega)$

- Formulations faibles, par exemple :

$$\int_{v\in\mathbb{R}^d} Q_{ij}^{\mathrm{b}}(f,g)(v)\,\psi_i(v)\,dv$$
$$= \iint_{v,v_*\in\mathbb{R}^d}\int_{\omega\in S^{d-1}} B_{ij}(v,v_*,\omega)f(v)g(v_*)\,\left[\psi_i(v') - \psi_i(v)\right]\,d\omega\,dv\,dv_*$$

Propriétés conservatives de Q_i^{m} et Q_{ij}^{b}

- Noyaux mono-espèces

$$\int_{v\in\mathbb{R}^d} Q_i^{\mathsf{m}}(f,f)(v) \begin{pmatrix} 1 \\ v \\ |v|^2/2 \end{pmatrix} dv = 0$$

- Noyaux bi-espèces, $i \neq j$

$$\int_{v\in\mathbb{R}^d} Q_{ij}^{\mathsf{b}}(f,g)(v)\, dv = 0$$

$$\int_{v\in\mathbb{R}^d} Q_{ij}^{\mathsf{b}}(f,g)(v) \begin{pmatrix} m_i\, v \\ m_i\, |v|^2/2 \end{pmatrix} dv + \int_{v\in\mathbb{R}^d} Q_{ji}^{\mathsf{b}}(g,f)(v) \begin{pmatrix} m_j\, v \\ m_j\, |v|^2/2 \end{pmatrix} dv = 0$$

Théorème H – Hyp. : B_i, $B_{ij} > 0$

Théorème

1. Pour tout $f_i := f_i(v) \geq 0$ où cela a un sens, on a

$$\sum_i \int_{v\in\mathbb{R}^d} \left(Q_i^{\mathsf{m}}(f_i,f_i)(v) + \sum_{j\neq i} Q_{ij}^{\mathsf{b}}(f_i,f_j)(v) \right) \log\left(\frac{f_i(v)}{{m_i}^d}\right) dv \leq 0$$

2. Équivalence entre

(a) $Q_i^{\mathsf{m}}(f_i,f_i) = 0$, $Q_{ij}^{\mathsf{b}}(f_i,f_j) = 0$

(b) $\displaystyle\sum_i \int_{v\in\mathbb{R}^d} \left(Q_i^{\mathsf{m}}(f_i,f_i)(v) + \sum_{j\neq i} Q_{ij}^{\mathsf{b}}(f_i,f_j)(v) \right) \log\left(\frac{f_i(v)}{{m_i}^d}\right) dv = 0$

(c) Il existe $T > 0$ et $u \in \mathbb{R}^d$ tels que, pour tout i,

$$f_i(v) = \xi_i \left(\frac{m_i}{2\,\pi\,T}\right)^{d/2} \exp\left(-\frac{m_i}{2T}|v-u|^2\right).$$

Modèle rééchelonné

- Paramètre de rééchelonnement :
  libre parcours moyen $\varepsilon > 0$ ($\sim$ Kn ou Ma)

- Sections efficaces : molécules maxwelliennes
  $B_{ij}(v, v_*, \omega) = B_{ij}(\omega)$, $B_{ij} \in L^1$, $B_{ij}(\omega) = B_{ij}(-\omega)$, $\|B_{ij}\|_{L^1} = \|B_{ji}\|_{L^1}$
- Équations de Boltzmann posées dans $]0, +\infty[_t \times \Omega_x \times \mathbb{R}^d{}_v$

$$\varepsilon\, \partial_t f_i^\varepsilon + v \cdot \nabla_x f_i^\varepsilon = \frac{1}{\varepsilon} \left[Q_i^{\mathsf{m}}(f_i^\varepsilon, f_i^\varepsilon) + \left(\sum_{j \neq i} Q_{ij}^{\mathsf{b}}(f_i^\varepsilon, f_j^\varepsilon) \right) \right]$$

- Réflexions spéculaires sur $\partial\Omega$:
  $f_i^\varepsilon(t, x, v) = f_i^\varepsilon(t, x, v - 2(v \cdot \nu_x)\nu_x)$, $(t, x, v) \in \mathbb{R}^+ \times \partial\Omega \times \mathbb{R}^d$
- Condition initiale :
  $f_i^\varepsilon(0, x, v) = \xi_i^{\mathsf{in}}(x) \left(\dfrac{m_i}{2\,\pi\, T^{\mathsf{in}}} \right)^{d/2} \exp\left(-m_i |v|^2 / 2T^{\mathsf{in}}\right)$

Aperçu de l'exposé

Passage à la limite

- $\xi_i^\varepsilon(t,x) = \int_{v\in\mathbb{R}^d} f_i^\varepsilon(t,x,v)\,dv \longrightarrow \xi_i(t,x)$ quand $\varepsilon \to 0$
- $N_i^\varepsilon(t,x) = \dfrac{1}{\varepsilon}\int_{v\in\mathbb{R}^d} v f_i^\varepsilon(t,x,v)\,dv \longrightarrow N_i(t,x)$ quand $\varepsilon \to 0$
  $N_i < +\infty$: hypothèse de travail habituelle en limite diffusive
- $f_i^\varepsilon \to f_i$ à l'équilibre mécanique, donc f_i de la forme
  $$f_i(t,x,v) = \xi_i(t,x)\left(\frac{m_i}{2\pi T(t,x)}\right)^{d/2} \exp\left(-\frac{m_i}{2T(t,x)}|v-u(t,x)|^2\right)$$
- $\varepsilon N_i^\varepsilon \to 0 \Rightarrow u \equiv 0$
- Pression uniforme, $C = \sum \xi_i \equiv 1$ et hyp. gaz parfait $\Rightarrow T \equiv \mathrm{C^{te}}$

Conservation de la masse

- On intègre l'équation de Boltzmann par rapport à $v \in \mathbb{R}^d$:

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\int_{\mathbb{R}^d} f_i^\varepsilon(v)\, dv\right) + \frac{1}{\varepsilon}\nabla_x \cdot \left(\int_{\mathbb{R}^d} v f_i^\varepsilon(v)\, dv\right) = 0,$$

où les opérateurs de collision disparaissent par invariance.

- Puis on fait $\varepsilon \to 0$:

$$\partial_t \xi_i + \nabla_x \cdot N_i = 0.$$

Conservation de la quantité de mouvement

- On multiplie l'équation de Boltzmann par v_ℓ, $1 \leq \ell \leq d$, et on intègre par rapport à $v \in \mathbb{R}^d$:

$$\varepsilon \frac{\partial}{\partial t} \int_{\mathbb{R}^d} v_\ell f_i^\varepsilon(v)\, dv + \nabla_x \cdot \left(\int_{\mathbb{R}^d} v_\ell f_i^\varepsilon(v)\, v\, dv \right)$$
$$= \frac{1}{\varepsilon} \sum_{j \neq i} \int_{\mathbb{R}^d} v_\ell\, Q_{ij}^{\mathsf{b}}(f_i^\varepsilon, f_j^\varepsilon)(v)\, dv := \Theta_\ell^\varepsilon,$$

  où l'opérateur de collision mono-espèce disparaît par invariance.

- Règles de collision et formulation faible de $Q_{ij}^{\mathsf{b}} \Rightarrow$

$$\Theta_\ell^\varepsilon = \frac{1}{\varepsilon} \sum_{j \neq i} \frac{m_j}{m_i + m_j} \left[\iint_{\mathbb{R}^{2d}} \int_{S^{d-1}} B_{ij}(\omega) f_i^\varepsilon(v) f_j^\varepsilon(v_*)\ (v_{*\ell} - v_\ell)\ d\omega\, dv_*\, dv \right.$$
$$\left. + \iint_{\mathbb{R}^{2d}} \int_{S^{d-1}} B_{ij}(\omega) f_i^\varepsilon(v) f_j^\varepsilon(v_*)\, |v - v_*| \omega_\ell\, d\omega\, dv_*\, dv \right]$$

Passage à la limite

- $\varepsilon \to 0 \Rightarrow$

$$\nabla_x \cdot \left(\int_{\mathbb{R}^d} v_\ell f_i(v)\, v\, dv \right) = \sum_{j \neq i} \frac{m_j}{m_i + m_j} \|B_{ij}\|_{L^1} \left(\xi_i (N_j)_\ell - \xi_j (N_i)_\ell \right)$$

- Terme $\nabla_x \cdot (\dots)$

$$= \sum_{k=1}^{d} \frac{\partial \xi_i}{\partial x_k} \int_{\mathbb{R}^d} v_\ell\, v_k \left(\frac{m_i}{2\pi T} \right)^{d/2} e^{-m_i |v|^2 / 2T}\, dv = \frac{T}{m_i} \frac{\partial \xi_i}{\partial x_\ell}$$

- Loi de Maxwell-Stefan ($C = 1$)

$$-\nabla_x \xi_i = \sum_{j \neq i} \frac{\xi_j N_i - \xi_i N_j}{D_{ij}} \qquad \text{avec } D_{ij}^{-1} = \frac{m_i m_j \|B_{ij}\|_{L^1}}{(m_i + m_j) T}$$