

Modèle non linéaire de diffusion pour l'air

Bérénice GREC, Université Paris Descartes

Laurent BOUDIN, UPMC & INRIA

Dario GOETZ, TU Darmstadt

Francesco SALVARANI, Università degli Studi di Pavia & INRIA

Mots-clés : Modèles de diffusion dans le poumon, Loi de Maxwell-Stefan, Simulations numériques

Les voies respiratoires ont une géométrie complexe : il s'agit d'un arbre composé de 23 générations. Les tailles des bronchioles des générations inférieures sont trop petites pour permettre une observation médicale. À partir de la 17ème génération, où ont lieu les échanges gazeux au niveau des alvéoles pulmonaires, le phénomène prépondérant qui met en mouvement les molécules d'air est la diffusion, tandis que la convection devient négligeable. Ceci motive l'étude d'un modèle mathématique pertinent permettant de décrire de manière satisfaisante les phénomènes de diffusion pour un gaz à plusieurs composants.

Le modèle de diffusion de Maxwell-Stefan [1] que nous considérons est plus complexe que le modèle de Fick classique, et prend en compte les effets de friction entre les différentes espèces. Plus précisément, aux équations de conservation de la masse reliant la concentration c_i et le flux \mathbf{N}_i de chaque espèce $\partial_t c_i + \nabla \cdot \mathbf{N}_i = 0$, nous couplons les lois de Maxwell-Stefan. Ces lois relient de manière non linéaire le gradient de concentration de l'espèce i aux flux \mathbf{N}_j des autres espèces par la relation :

$$-\nabla c_i = \frac{1}{c_t} \sum_{j \neq i} \frac{c_j \mathbf{N}_i - c_i \mathbf{N}_j}{D_{ij}},$$

où D_{ij} représentent les coefficients de diffusion binaire reliant les espèces i et j , et $c_t = \sum_i c_i$ est la concentration totale du mélange.

Nous nous intéressons à quelques propriétés mathématiques de ce modèle, d'un point de vue différent de celui abordé dans [3]. Nous mettons en évidence le phénomène de diffusion remontante observé expérimentalement dans [4], où le flux et le gradient de concentration d'une espèce sont de même signe, et nous obtenons un résultat d'existence, d'unicité et de vitesse de retour à l'équilibre sur les concentrations de chaque espèce dans une situation proche de celle de [4].

Nous montrons ensuite des simulations numériques issues de [2]. Nous retrouvons tout d'abord les résultats expérimentaux de [4]. Dans les voies respiratoires, nous constatons que le modèle de Fick est suffisant pour décrire la respiration usuelle. Cependant, nous mettons en évidence l'importance du modèle de Maxwell-Stefan pour certaines situations physiologiques réalistes. En particulier, les traitements de certaines pathologies respiratoires (bronchopneumopathies obstructives chroniques) font intervenir un mélange d'hélium et d'oxygène à la place de l'air inspiré. Le modèle de Maxwell-Stefan est alors indispensable pour rendre compte avec précision de l'évolution en fonction du temps des quantités d'oxygène dans les bronchioles.

Références

- [1] R. KRISHNA, J.A. WESSELINGH, *The Maxwell-Stefan approach to mass transfer*, Chemical Engineering Science, 52:861–911, 1997.
- [2] L. BOUDIN, D. GÖTZ, B. GREC, *Diffusion models of multicomponent mixtures in the lung*, soumis.
- [3] V. GIOVANGIGLI, *Multicomponent flow modeling*, Birkhäuser Boston, 1999.
- [4] J.B. DUNCAN, H.L. TOOR, *An experimental study of three component gas diffusion*, AIChE Journal, 8(1):3841, 1962.

Bérénice GREC, MAP5, Université Paris Descartes, 45 rue des Saints Pères, F-75270 Paris Cedex 06
berenice.grec@parisdescartes.fr

Laurent BOUDIN, UPMC LJLL & REO, 175 rue du Chevaleret, F-75013 Paris
laurent.boudin@upmc.fr

Dario GOETZ, FB Mathematik, TU Darmstadt, Schlossgartenstr 7, D-64289 Darmstadt
goetz@mathematik.tu-darmstadt.de

Francesco SALVARANI, Dip. di Mat. F. Casorati, Univ. degli Studi di Pavia, Via Ferrata 1, I-27100 Pavia
francesco.salvarani@unipv.it