Matematické modelování difúzního procesu s nelineární adsorpcí

Tomáš Fürst, Rostislav Vodák

Cílem naší práce je odvodit a teoreticky ošetřit model, který popisuje vymývání pevné látky usazené v porézním prostředí. Celý model, který popíšeme pomocí nelineární parciální diferenciální rovnice, je odvozen a sestaven na základě konkrétní aplikace v kožedělném průmyslu. Z matematického hlediska nás bude zajímat existence řešení, jeho jednoznačnost a stabilita, t.j. chování pro čas jdoucí k nekonečnu, a částečně i vliv hladkosti okrajových podmínek na hladkost řešení.

Odvození modelu: Při odvozování modelu předpokládáme, že část látky se nachází v porézním prostředí v podobě vodního roztoku a část je zde chemicky vázána adsorpcí. Dále předpokládáme, že v každém bodě a v každém okamžiku je koncentrace adsorbované látky v rovnováze s koncentrací vodního roztoku. Tato rovnováha je popsána pomocí Langmuirovy izotermy, která má tvar

$$c_A = \frac{Bc}{1 + Lc},$$

kde c_A je koncentrace adsorbované látky, c je koncentrace vodního roztoku, B a L jsou kladné konstanty. Označme Ω_0 oblast porézního prostředí a Ω ($\Omega_0 \subset \Omega$) oblast obsahující kromě porézního prostředí i okolní kapalinu, ve které dochází k celému procesu. Předpokládáme, že výše uvedené koncentrace c a c_A jsou funkcemi místa a času a že celý proces rozpouštění a odstranění látky z porézního prostředí je proces difúzní, tedy tok látky jednotkovou oblastí je přímo úměrný zápornému gradientu koncentrace (Fickův zákon), t.j. $\mathbf{q}(t, x) = -D(x)\nabla c(x, t)$, kde funkce D je difúzní koeficient. Celková změna koncentrace látky je pak rovna toku látky a tedy řídící rovnice má tvar

$$\partial_t[c + \chi_{\Omega_0} F(c)] - \operatorname{div}(D\nabla c) = 0 \text{ v } \Omega \times (0, T),$$

kde

$$F(z) = \begin{cases} \frac{Bz}{1+Lz}, & \text{pro } z \geq 0, \\ 0, & \text{pro } z < 0. \end{cases}$$

Jelikož celý systém je izolovaný, okrajová podmínka má tvar

$$\frac{\partial c}{\mathbf{n}}|_{\partial\Omega} = 0.$$

Zbývá doplnit počáteční podmínku

$$c(x,0) = c_0(x) \geq 0,\ x \in \Omega.$$

Zkoumané problémy a způsoby jejich řesení: Existence slabého řesení v prostorech $C([0,T); W^{-1,2}(\Omega_0) \cup W^{-1,2}(\Omega \backslash \Omega_0)) \cup L^2(0,T; W^{1,2}(\Omega))$ je dokázána pomocí Rotheho metody za předpokladu $c_0 \in L^2(\Omega)$. Zde bychom chtěli poukázat na skutečnost, že se nelze zbavit nelinearity v časové derivaci. Substituce $u = \chi_{\Omega_0} F(c)$ totiž není možná, neboť $\chi_{\Omega_0} F$ není na Ω Lipchitzovská funkce a tedy nemusí existova slabá derivace z $\chi_{\Omega_0} F(c)$. Dále ukážeme (díky monotonii funkce F) nezápornost řešení c a jeho jednoznačnost. Souběžně zkoumáme vlastnosti řesení pokud $c_0 \in L^\infty(\Omega)$ a $c_0 \in W^{1,2}(\Omega)$. Stabilizace řešení je založena na energetické nerovnosti, zachování hmoty, speciální verzi Poincarého nerovnosti a konstrukci příslušných Ljapunovských funkcionálů. Navíc pro $c_0 \in W^{1,2}(\Omega)$ ukážeme, že stabilizace probíhá exponenciálně.