ЖЭТФ, 1999, том 116, вып. 2(8), стр. 717–730

СТРУКТУРНАЯ УСТОЙЧИВОСТЬ ДИСПЕРСНЫХ СИСТЕМ И КОНЕЧНОСТЬ ФРОНТА КОАГУЛЯЦИИ

*П. Б. Дубовский**

Институт вычислительной математики Российской академии наук 117951, Москва, Россия

Поступила в редакцию 23 февраля 1999 г.

Выводится новая дискретная модель коагуляции, которая оказывается дискретной версией уравнения Оорта—Хулста—Сафронова. Показывается, что его ранее известная непрерывная версия позволяет, в отличие от уравнения Смолуховского, рассчитать распространение фронта коагуляции. Устанавливается связь между выполнением закона сохранения массы и конечностью фронта коагуляции, после чего делаются оценки момента нарушения закона сохранения массы для некоторых классов ядер коагуляции. Одним из выводов является то, что закон сохранения массы может быть нарушен и в тех случаях, когда частицы примерно равных масс не могут коагулировать, что имеет место, например, в гравитационной коагуляции. Сделаны оценки момента возникновения структурной неустойчивости системы для мультипликативных ядер коагуляции.

PACS-94: 02.30.Rz; 05.20.Dd

1. ПРЕДВАРИТЕЛЬНЫЕ ЗАМЕЧАНИЯ

Рассмотрим дисперсные системы, содержащие частицы разных масс, которые испытывают столкновения, приводящие к изменениям их масс. Обычно предполагается, что процесс коагуляции может быть рассмотрен как слияние двух сталкивающихся частиц. Исходя из этого предположения запишем уравнение Смолуховского [1, 2]:

$$\frac{dc_i}{dt} = \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{i-1} K_{i-j,j}c_{i-j}c_j - c_i\sum_{j=1}^{\infty} K_{i,j}c_j. \tag{1}$$

В непрерывном виде уравнение (1) записывается как [3]

$$\frac{\partial c(x,t)}{\partial t} = \frac{1}{2}\int_0^x K(x-y,y)c(x-y,t)c(y,t)dy - c(x,t)\int_0^\infty K(x,y)c(y,t)dy. \tag{2}$$

Однако имеется и другая непрерывная коагуляционная модель Оорта—Хулста [4], записанная в удобной форме Сафроновым [5]. Эта модель используется в астрономии для анализа космических объектов (возникновение звезд, планет, эволюция туманностей, галактик, облаков космической пыли и т. д.) [4–7], в геофизике [8–12] и в технических установках [9, 13].

*E-mail: dubovski@inm.ras.ru

В этой статье мы выводим новое дискретное уравнение коагуляции и доказываем, что оно является дискретной версией уравнения коагуляции Оорта—Хулста—Сафронова (разд. 3). Некоторые математические свойства двух основных коагуляционных моделей различны, поэтому они могут быть рассмотрены как полезные дополнения друг друга. При этом можно получить новые результаты по кинетике коагуляции.

В качестве примера такого полезного взаимодополнения мы вычисляем скорость фронта коагуляции, под которым имеется в виду смещение границы ненулевого значения функции распределения. Такие вычисления возможны лишь благодаря использованию уравнения Оорта—Хулста—Сафронова.

Далее мы отмечаем, что явление нарушения закона сохранения массы при интенсивной коагуляции происходит в те же моменты времени, когда фронт коагуляции уходит на бесконечность при финитных начальных данных. Это наблюдение позволяет выявить некоторые новые классы ядер коагуляции, приводящие к нарушению закона сохранения массы. Делаются оценки момента времени нарушения закона сохранения массы дисперсной системы при мультипликативных ядрах коагуляции вида $K(x,y) = x^\alpha y^\alpha$, $\alpha > 1$. Делается вывод о том, что сохранение массы может быть нарушено в случаях, когда частицы примерно равных масс не могут коагулировать, что имеет место, например, при гравитационной коагуляции.

Отметим, что термин «нарушение закона сохранения массы», общепринятый в математической литературе по коагуляции, не точно отражает физическую суть явления. На самом деле никакого нарушения закона сохранения массы не происходит (система ведь замкнута!), а вся масса (или ее часть) собирается в одном бесконечно большом кластере и, тем самым, перестает участвовать в кинетике коагуляции. В теории перколяции это называют перколяционным переходом, в теории полимеризации — гель-точкой, в астрофизике — коллапсом и т. д.

2. ДИСКРЕТНАЯ МОДЕЛЬ КОАГУЛЯЦИИ

Рассмотрим дисперсную систему, обладающую следующими свойствами:

1) система достаточно разрежена, для того чтобы предположить, что взаимодействующие частицы не испытывают влияния других частиц;

2) среднее время столкновений (микроскопическое время) существенно меньше, чем время изменения функции распределения;

3) существуют случайные силы, которые перемешивают дисперсную систему так, что движения частиц между актами столкновений (включая процесс их сближения) являются статистически независимыми;

4) массы (объемы) всех частиц пропорциональны некоторому $m_0 > 0$.

Пусть рост частиц происходит в результате столкновений пар частиц с массами im_0 и jm_0 (здесь и далее для определенности мы предполагаем, что $i \geq j$). Частицы с массами im_0 называются i-мерами, m_0 — масса наименьших частиц в системе.

Предположим, что столкновение i-мера и j-мера приводит к дроблению меньшего j-мера на j мономеров, которые мгновенно присоединяются к i-мерам. Итак, в качестве результата одного акта столкновений мы имеем $(i+1)$-меры (их j штук), а j-мер исчезает.

Из соображений баланса мы приходим к следующей кинетической модели:

$$\frac{dc_i(t)}{dt} = c_{i-1}(t)\sum_{j=1}^{i-1} K_{i-1,j}jc_j(t) - c_i(t)\sum_{j=1}^{i} K_{i,j}jc_j(t) - \sum_{j=i}^{\infty} K_{i,j}c_i(t)c_j(t), \quad i \geq 1, \tag{3}$$

где $c_i(t)$ — концентрация i-меров в момент времени t, $K_{i,j}$ $(i \neq j)$ — как всегда, ядро коагуляции, характеризующее интенсивность столкновений i-меров и j-меров. Величина $K_{i,i}$ равна половине интенсивности столкновений частиц с массой i. Это вызвано двойным уменьшением пар частиц при их взаимодействии.

Первое слагаемое в правой части (3) дает приток i-меров в дисперсную систему благодаря столкновениям $(i-1)$-меров и мономеров, появившихся в результате дробления j-мера. Если $i = 1$, то это слагаемое полагается равным нулю. Второе слагаемое описывает уменьшение i-меров как результат слияния с ним мономеров. Множитель j в первом и втором слагаемых показывает, что j мономеров участвуют в одном столкновительном акте. Третий член описывает уменьшение числа i-меров в результате их дробления.

Если мы дополним уравнение (3) неотрицательными начальными данными $c_i(0)$, то можно заметить, что его решения будут также неотрицательны. Действительно, запишем (3) в следующей интегральной форме:

$$\begin{aligned} c_i(t) = \exp\left\{-\int_0^t \left(\sum_{j=1}^{i} K_{i,j}jc_j(s) + \sum_{j=i}^{\infty} K_{i,j}c_j(s)\right) ds\right\} \times \\ \times \left(c_i(0) + \int_0^t \exp\left\{\int_0^s \left[\sum_{j=1}^{i} K_{i,j}jc_j(s_1) + \sum_{j=i}^{\infty} K_{i,j}c_j(s_1)\right] ds_1\right\} \times \right. \\ \left. \times \left[c_{i-1}(s)\sum_{j=1}^{i-1} K_{i-1,j}jc_j(s)\right] ds\right). \end{aligned} \tag{4}$$

Если начальные данные $c_i(0)$ строго положительны, то для обрезанного ядра коагуляции $K_{m,j} = 0$, $m, j \geq N_0$, мы легко получаем положительность $c_i(t)$ для всех $i \geq 1$, $t > 0$, предполагая, что найдется момент времени t_0 и число i_0 такие, что $c_{i_0}(t_0) = 0$, что противоречит (4). Если начальные данные не являются строго положительными, то мы аппроксимируем их положительными начальными данными и получаем неотрицательность решения путем перехода к пределу. Эти рассуждения близки к [14, 15]. Неотрицательность решения для необрезанных ядер коагуляции может быть получена наряду с теоремой существования решения путем аппроксимации $K_{m,j}$ последовательностью финитных ядер, порождающих последовательность неотрицательных решений (4), после чего делается переход к пределу — решению (4).

Проверим, подчиняется ли уравнение (3) закону сохранения массы

$$N_1 \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{i=1}^{\infty} ic_i(t) = \text{const}. \tag{5}$$

С этой целью мы умножаем (3) на i и суммируем его по $1 \leq i \leq \infty$. Тогда получаем

$$\frac{dN_1}{dt} = \sum_{i=1}^{\infty}\sum_{j=1}^{i-1} ijK_{i-1,j}c_{i-1}c_j - \sum_{i=1}^{\infty}\sum_{j=1}^{i} ijK_{i,j}c_ic_j - \sum_{i=1}^{\infty}\sum_{j=i}^{\infty} iK_{i,j}c_ic_j.$$

При этом в третьем слагаемом мы заменили порядок суммирования и пришли к суммированию по $\sum_{j=1}^{\infty}\sum_{i=1}^{j}$. Затем во втором и третьем членах мы отделим слагаемые при $j = i$ и сделаем замену $i = i' + j'$, $j = j'$. Тогда получим

$$\frac{dN_1}{dt} = \sum_{i=1}^{\infty}\sum_{j=1}^{\infty}(i+j)jK_{i+j-1,j}c_{i+j-1}c_j - \sum_{i=1}^{\infty}\sum_{j=1}^{\infty}(i+j)jK_{i+j,j}c_{i+j}c_j -$$
$$- \sum_{i=1}^{\infty} i(i+1)K_{i,i}c_i^2 - \sum_{i=1}^{\infty}\sum_{j=1}^{\infty} jK_{i+j,j}c_{i+j}c_j.$$

После ряда замен типа $i \mapsto i+1$ получается нуль и, таким образом, мы приходим к закону сохранения массы.

3. ПЕРЕХОД К УРАВНЕНИЮ ООРТА—ХУЛСТА—САФРОНОВА

Важным наблюдением является то, что переход к пределу $m_0 \to 0$ в (3) дает хорошо известную непрерывную модель коагуляции

$$\frac{\partial c(x,t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}\left[c(x,t)\int_0^x yK(x,y)c(y,t)dy\right] - \int_x^{\infty} K(x,y)c(x,t)c(y,t)dy. \qquad (6)$$

Действительно, для получения непрерывной формы уравнения (3) введем функцию распределения $c(x,t)$, описывающую распределение частиц массой x в момент времени t, т. е. $c(x,t)dx$ равно количеству частиц с массами от $(x, x+dx)$ в момент t. Масса i-меров равна im_0, поэтому $c_i(t) = c(im_0,t)m_0$. Поскольку $K_{i,j} = K(im_0, jm_0)$, имеем

$$K_{i,j}c_i(t)c_j(t) = K(im_0, jm_0)c(im_0,t)c(jm_0,t)m_0^2.$$

Следовательно, заменяя $x = im_0$, получаем

$$\frac{\partial c(x,t)}{\partial t} = -\frac{1}{m_0}\Bigg[c(x,t)\sum_{j=1}^{x/m_0} K(x, jm_0)c(jm_0,t)jm_0 -$$
$$- c(x-m_0,t)\sum_{j=1}^{x/m_0-1} K(x-m_0, jm_0)c(jm_0,t)jm_0\Bigg]m_0 -$$
$$- c(x,t)\sum_{j=i}^{\infty} K(x, jm_0)c(jm_0,t)m_0.$$

Поскольку эти суммы являются попросту интегральными суммами Дарбу, мы переходим к пределу $m_0 \to 0$ и получаем (6). Уравнение (6) было выведено совершенно иными методами Ортом и Хулстом [4] и было записано в форме (6) Сафроновым [5]. Итак, оказывается, что уравнение (6) является непрерывной формой нового дискретного уравнения (3). Интересно упомянуть, что ранее не было дискретных версий уравнения (6). Обычно непрерывные предельные уравнения выводятся из их дискретных аналогов. В качестве примера можно указать на уравнение Смолуховского, которое было вначале получено в дискретном виде (1) [1, 2], а затем его непрерывная форма (2) была выведена Мюллером [3]. Другой, более недавний пример может быть найден в [16], где авторы сначала выводят дискретную мономер-мономерную модель гетерогенного катализа, а затем переходят к предельному уравнению в непрерывной форме. В этой связи упомянем также работы [17–19]. Дополнительно отметим, что возможны и другие подходы к выводу коагуляционных моделей [20].

Некоторые рассуждения, имеющие небольшую общность с нашим выводом уравнения (3), могут быть найдены в [13, с. 131], где авторы отмечают связь между (6) и следующим процессом: l частиц массы x в течение времени Δt взаимодействуют с маленькими частицами массой μ/l, $\mu < x$. Эта связь выводится на основе разложения в ряды некоторых функций и на основе «обрезания» этих рядов без должного обоснования (ср. также с [8, с. 45] и [9, с. 154]).

Уравнение Оорта—Хулста—Сафронова (6) может быть рассмотрено как модель непрерывного роста [5, 9]. Действительно, если предположить, что все частицы растут как результат присоединения более маленьких частиц, то первый интеграл правой части (6) равен dx/dt, а все первое слагаемое есть попросту изменение $c(x,t)$ благодаря присоединению частиц с массами y, $y < x$. Значит, без последнего члена уравнение (6) является одномерным уравнением непрерывности с «плотностью» $c(x,t)$ и «скоростью» dx/dt. Второй член в (6) ответствен за уход частиц массой x как результат их «седиментации» на более крупные частицы. Итак, частица сохраняет свою «индивидуальность» при столкновениях с меньшими частицами, но теряет ее при столкновениях с более крупными частицами. Другими словами, столкновения частиц массой x с меньшими частицами изменяет массу частиц x, а столкновения с более крупными частицами изменяют количество частиц с массой x. Эта процедура дает усредненную и сглаженную интенсивность роста всех частиц определенного радиуса.

Стоит упомянуть, что в работах [6, 7] уравнение (6) применялось к исследованию эволюции различных космических объектов. Аналогичный подход для коагуляционного роста, включающий малое количество одинаковых больших капель, падающих в однородной, случайно распределенной взвеси меньших капель, был использован для расчета коагуляционных процессов в атмосферных облаках Телфордом [10], который решал уравнение Оорта—Хулста—Сафронова (6) без второго члена в правой части. В более поздних статьях [11, 12] было показано соответственно численно и аналитически, что метод [10] (и, следовательно, уравнение (6)) дает результаты, подобные более известному кинетическому подходу Смолуховского. Также в работах [9, 13] указано, что уравнение (6) полезно и для исследования процессов в технических установках, использующих двухфазные среды (в соплах и двигателях).

4. РАСПРОСТРАНЕНИЕ ВОЗМУЩЕНИЙ

Существенной разницей между рассматриваемыми моделями коагуляции является то, что, в отличие от уравнения Оорта—Хулста—Сафронова (6), уравнение Смолуховского (2) распространяет возмущения с бесконечной скоростью. Чтобы продемонстрировать это, положим $K \equiv 1$ и дополним уравнение (2) финитными начальными данными $c_0(x) = \theta(1-x)$, где ступенчатая функция $\theta(x) = 1$ при $x \geq 0$ и нулю при $x < 0$. Нашей целью является показать, что в любой сколь угодно малый положительный момент времени функция распределения, подчиняющаяся уравнению (2), становится не-нулевой при сколь угодно больших значениях аргумента x.

Используя преобразование Лапласа, получаем для образа Лапласа $F(p,t)$ следующее выражение:

$$F(p,t) = \frac{4(1-e^{-p})}{(2+t)[p(2+t)+t\exp(-p)-t]}.$$

Для нахождения оригинала найдем особые точки функции $F(p,t)$ на комплексной плоскости переменной $p = a + ib$, $a, b \in R^1$. Обозначая

$$\frac{2+t}{t} = \alpha > 1,$$

получаем систему уравнений

$$\begin{cases} \alpha a = 1 - e^{-a}\cos b, \\ \alpha b = e^{-a}\sin b, \end{cases}$$

из которой имеем

$$a = \frac{1}{\alpha} - b\,\mathrm{ctg}\,b, \quad \alpha e^{1/\alpha} b = e^{b\,\mathrm{ctg}\,b}\sin b.$$

Поэтому особыми точками являются точки $p_n = a_n + ib_n$:

$$\begin{gathered} b_n = 2\pi n + \varepsilon_n, \quad b_{-n} = -2\pi n - \varepsilon_n, \; n \ge 1, \\ a_n = a_{-n} = \frac{1}{\alpha} - b_n \mathrm{ctg}\,b_n < 0, \quad n \ge 1, \\ \varepsilon_n > 0, \; \varepsilon_n \to 0, \; n \to \infty. \end{gathered}$$

Отметим, что

$$\begin{aligned} &\varepsilon_n \sim \frac{2\pi n}{\ln(2\pi n/e) + \ln\alpha}, \; n \ge 1, \\ &b_n \mathrm{ctg}\,b_n = b_{-n}\mathrm{ctg}\,b_{-n} \sim 1 + \frac{2\pi n}{\varepsilon_n}, \\ &a_n \sim \frac{1}{\alpha} - \ln\alpha - \ln(2\pi n). \end{aligned}$$

Выясним вид особенностей в точках p_n. С этой целью найдем предел

$$\lim_{p\to p_n}(p-p_n)C(p,t) = \frac{4(1-e^{-p_n})}{(2+t)t}\lim_{p\to p_n}\frac{p-p_n}{\alpha p + e^{-p} - 1}.$$

Рассмотрим подробнее последний предел:

$$\lim_{p\to p_n}\frac{p-p_n}{\alpha p + e^{-p} - 1} = \lim_{p\to p_n}\frac{p-p_n}{\alpha(p-p_n) + \alpha p_n + e^{-(p-p_n)}e^{-p_n} - 1} = \frac{1}{\alpha - e^{-p_n}} \ne 0. \qquad (7)$$

Для получения последнего равенства мы учли, что $\alpha p_n - 1 + e^{-p_n} = 0$, использовали разложение $e^{-(p-p_n)}$ в ряд по $p - p_n$. Следовательно, точки p_n являются полюсами первого порядка функции $F(p,t)$, что позволяет легко определить из (7) вычеты функции $e^{px}F(p,t)$ в этих точках и записать решение уравнения (2) в виде

$$c(x,t) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{p_n x} \frac{4(1-e^{-p_n})}{(2+t)t(\alpha - e^{-p_n})} =$$
$$= \frac{4}{(2+t)t} \sum_{n=1}^{\infty} \left[\frac{e^{p_n x}(1-e^{-p_n})}{\alpha - e^{-p_n}} + \frac{e^{p_{-n} x}(1-e^{-p_{-n}})}{\alpha - e^{-p_{-n}}} \right].$$

Заменяя $p_n = a_n + 2\pi i n + i\varepsilon_n$, $p_{-n} = a_n - 2\pi i n - i\varepsilon_n$, окончательно получаем

$$c(x,t) = \frac{4}{(2+t)t} \sum_{n=1}^{\infty} e^{a_n x} \left[\frac{e^{ib_n x}(1-e^{-a_n}e^{-i\varepsilon_n})}{\alpha - e^{-a_n}e^{-i\varepsilon_n}} + \frac{e^{-ib_n x}(1-e^{-a_n}e^{i\varepsilon_n})}{\alpha - e^{-a_n}e^{i\varepsilon_n}} \right] =$$
$$= \frac{8}{(2+t)} \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ e^{a_n(x+1)} \frac{[(2+t)e^{a_n} - t\cos\varepsilon_n]\cos(b_n x) + t\sin\varepsilon_n \sin(b_n x)}{(2+t)^2 e^{2a_n} - 2t(2+t)e^{a_n}\cos\varepsilon_n + t^2} - \right.$$
$$\left. - e^{a_n x} \frac{[(2+t)e^{a_n} - t\cos\varepsilon_n]\cos(b_n(x-1)) + t\sin\varepsilon_n \sin(b_n(x-1))}{(2+t)^2 e^{2a_n} - 2t(2+t)e^{a_n}\cos\varepsilon_n + t^2} \right\}. \tag{8}$$

Следовательно, даже если начальные данные равны нулю при $x \geq 1$, решение мгновенно становится положительным для сколь угодно больших значений x. Действительно, если бы нашелся момент времени $t_0 > 0$ и отрезок $[x_1, x_2]$ такие, что в этом отрезке $c(x, t_0) = 0$, то разложение этой нулевой функции по базису[1)]

$$e^{a_n x}\cos(b_n x), e^{a_n x}\sin(b_n x), \ n \geq 1, \tag{9}$$

дало бы нулевые коэффициенты, что не соответствует (8).

Следовательно, ненулевое начальное значение распространяется с бесконечной скоростью. Этот недостаток подобен, например, свойству уравнения теплопроводности и математически означает, что уравнения (1), (2) обладают параболическими свойствами.

В отличие от уравнения Смолуховского, уравнение (6) не обладает таким недостатком. Действительно, можно переписать (6) в следующем виде

$$\frac{\partial c(x,t)}{\partial t} + v(x,t)\frac{\partial c(x,t)}{\partial x} = -c(x,t)\left(\int_0^x y\,\partial_1 K(x,y)c(y,t)dy\right) -$$
$$-xK(x,x)c^2(x,t) - c(x,t)\int_x^{\infty} K(x,y)c(y,t)dy, \tag{10}$$

где

$$v(x,t) = \int_0^x yK(x,y)c(y,t)dy$$

[1)] Точнее, речь идет о базисе, который получается из (9) путем добавления константы и всевозможных произведений элементов (9), что на основании теоремы Стоуна—Вейерштрасса и порождает на каждом компакте из $[x_0, \infty)$ всюду плотную алгебру.

и $\partial_1 K(x,y)$ означает дифференцирование K по первому аргументу. Пусть $x(s)$ — решение характеристического уравнения $dx/dt = v(x,t)$. Тогда подстановка

$$c(x,t) = \exp\left\{ -\int_0^t \left[K(x(s),x(s))c(x(s),s)x(s) - \int_0^{x(s)} y\partial_1 K(x(s),y)c(y,s)dy - \right.\right.$$
$$\left.\left. - \int_{x(s)}^{\infty} K(x(s),y)c(y,s)dy \right] ds \right\} u(x,t) \tag{11}$$

дает

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} + v(x,t)\frac{\partial u(x,t)}{\partial x} = 0. \tag{12}$$

Из (11) мы видим, что функции $c(x,t)$ и $u(x,t)$ равны или не равны нулю в одних и тех же точках. Характеристическое уравнение для (10), (12) имеет следующий вид:

$$\frac{dx}{dt} = v(x,t). \tag{13}$$

Из простого уравнения (12) заключаем, что если $c_0(x_1) = 0$, то $c(x_1,t)$ становится положительным не раньше чем в момент t_1, когда первая характеристическая кривая $x(s)$ с ненулевым начальным значением x_0 прибудет в точку x_1.

Таким образом, уравнение (6) обеспечивает физически разумную ограниченность скорости распространения возмущений и тем самым позволяет вычислить коагуляционный фронт[2)]. Математически это означает, что уравнение (6) обладает определенными гиперболическими свойствами.

5. НАРУШЕНИЕ ЗАКОНА СОХРАНЕНИЯ МАССЫ. ЯДРА $K(x,y) = (xy)^\alpha$

Основываясь на рассуждениях предыдущего раздела, оценим коагуляционный фронт в некоторых случаях. Пусть $c_0(x) = 0$, если $x \geq x_0$. Тогда характеристическая кривая с началом в точке x_0 разделяет плоскость на две части так, что $c(x,t) = 0$, если точка (x,t) находится справа от характеристики. Эту характеристическую кривую мы называем граничной характеристикой или коагуляционным фронтом. Из уравнения характеристик (13) видим, что фронт коагуляции удовлетворяет следующему уравнению

$$\frac{dx}{dt} = \int_0^x yK(x,y)c(y,t)dy = \int_0^\infty yK(x,y)c(y,t)dy \tag{14}$$

с начальным значением $x(0) = x_0$.

Значит, если $K(x,y) = C = \text{const}$, то

$$x(t) = x_0 + CN_1 t, \tag{15}$$

[2)] Напомним, что под фронтом коагуляции мы понимаем смещение границы ненулевого значения функции распределения.

где N_1 — постоянный первый момент решения.

Аналогично можно показать, что для аддитивного ядра коагуляции (т. е. при $K(x,y) = (x+y)$) значение фронта коагуляции имеет вид

$$x(t) = \exp(N_1 t)\{x_0 + N_2(0)t\}, \tag{16}$$

так что в случае аддитивных ядер коагуляции коагуляционный фронт движется быстрее, чем для постоянных ядер, что вполне естественно.

Оценим коагуляционный фронт для мультипликативного ядра $K(x,y) = xy$. Из (14) мы видим, что

$$x(t) = x_0 \exp\left(\int_0^t N_2(s)ds\right).$$

Для уравнения Смолуховского (2) получаем неограниченность второго момента $N_2(t)$ в критический момент $t_{cr} = [N_2(0)]^{-1}$:

$$N_2(t) = N_2(0)(1 - N_2(0)t)^{-1}.$$

Воспользуемся соотношениями

$$\int_0^\infty \int_0^x x^k y^k c(x)c(y)dy\,dx = \frac{1}{2}\left(\int_0^\infty x^k c(x)dx\right)^2,$$

$$\int_x^\infty y^k c(y)dy \le \frac{1}{x}\int_x^\infty y^{k+1}c(y)dy,$$

с учетом которых для модели Оорта—Хулста—Сафронова мы также получаем неограниченность второго момента для мультипликативного ядра $K(x,y) = xy$:

$$\frac{N_2(0)}{1 - N_2(0)t/2} \le N_2(t) \le \frac{N_2(0)}{1 - N_2(0)t}.$$

В этом случае $[N_2(0)]^{-1} \le t_{cr} \le 2[N_2(0)]^{-1}$.

Итак, можно видеть, что коагуляционный фронт уходит на бесконечность при $t \to t_{cr}$.

Обратим внимание на другой эффект влияния бесконечности — на нарушение закона сохранения массы в тот же самый критический момент t_{cr}. Хорошо известно, что этот эффект для уравнения Смолуховского (2) вызван обращением в бесконечность второго момента решения N_2 (см., например, [14, 21–26]). Таким образом, оказывается, что уход коагуляционного фронта на бесконечность означает нарушение закона сохранения массы. Это наблюдение позволяет установить нарушение закона сохранения массы для ряда других ядер коагуляции, которые ранее не поддавались анализу.

Рассмотрим ядра $K(x,y) = x^\alpha y^\alpha$, $\alpha > 1$. Оценим время возникновения структурной неустойчивости системы, при которой происходит нарушение закона сохранения массы. Решая уравнение (14) с данным ядром, получаем

$$x^{\alpha-1} = \left\{ \frac{1}{x_0^{\alpha-1}} - (\alpha - 1) \int_0^t N_{1+\alpha}(s) ds \right\}^{-1}. \tag{17}$$

Здесь, как обычно, символом $N_k(t)$ обозначен k-ый момент функции распределения. Из (17) видим, что коагуляционный фронт уходит на бесконечность не позже, чем $(\alpha+1)$-ый момент решения станет бесконечным. Оценим $N_{1+\alpha}(t)$. С этой целью проинтегрируем (2) с весом x^k:

$$\frac{N_k(t)}{dt} = \frac{1}{2} \int_0^\infty \int_0^\infty K(x,y)[(x+y)^k - x^k - y^k] c(x,t) c(y,t) dx\, dy. \tag{18}$$

Воспользуемся следующим неравенством, доказательство которого можно найти в Приложении:

$$(x+y)^\gamma - x^\gamma - y^\gamma \geq (2^\gamma - 2) x^{\gamma/2} y^{\gamma/2}, \quad \gamma \geq 2, \ x, y \geq 0. \tag{19}$$

Тогда при $k = \gamma = 1 + \alpha$ получаем

$$\frac{dN_{1+\alpha}}{dt} \geq (2^\alpha - 1) N^2_{(1+3\alpha)/2} \geq (2^\alpha - 1) N^2_{1+\alpha}(t), \ t \geq 0. \tag{20}$$

Из (20) следует, что уход на бесконечность коагуляционного фронта, а вместе с ним и нарушение закона сохранения массы произойдут в системе не позже, чем в момент времени

$$t_1 = [(2^\alpha - 1) N_{1+\alpha}(0)]^{-1},$$

когда $N_{1+\alpha}$ равен бесконечности. Из (20) следует также, что $N_{1+\alpha}$ и $N_{(1+3\alpha)/2}$ обращаются в бесконечность одновременно. Применяя n раз неравенство (19) и подставляя каждый раз результат в (18), получаем

$$\frac{d}{dt} N_{\frac{1+(2^n-1)\alpha}{2^n-1}} \geq \left(2^{\frac{1+(2^n-1)\alpha}{2^n-1} - 1} - 1 \right) N_{\frac{1+(2^{n+1}-1)\alpha}{2^n}}, \quad n \geq 1, \quad t \geq 0.$$

Все интегральные моменты в этой цепочке одновременно становятся бесконечно большими. Устремляя n к бесконечности,

$$\lim_{n\to\infty} \frac{1 + (2^{n+1} - 1)\alpha}{2^n} = 2\alpha,$$

устанавливаем, что нарушение сохранения массы происходит не позже обращения $N_{2\alpha}$ в бесконечность. Поэтому оценим $N_{2\alpha}$. Подставим в (18) $k = 2\alpha$ и вновь воспользуемся неравенством (19):

$$\frac{dN_{2\alpha}(t)}{dt} \geq \left(2^{2\alpha-1} - 1\right) N^2_{2\alpha}(t), \ t \geq 0.$$

Значит,

$$t_{cr} \leq \left[\left(2^{2\alpha-1} - 1\right) N_{2\alpha}(0)\right]^{-1}, \tag{21}$$

где t_{cr} — критический момент нарушения закона сохранения массы системы.

Отметим, что в (21) получен разумный с физической точки зрения результат: чем меньше интенсивность слияний крупных частиц (чем меньше α), тем позже нарушается закон сохранения массы. Оценка (21) при $\alpha = 1$ переходит в известное значение

$$t_{cr} = [N_2(0)]^{-1}$$

для ядра $K(x, y) = xy$.

6. НАРУШЕНИЕ ЗАКОНА СОХРАНЕНИЯ МАССЫ ДЛЯ ДРУГИХ ЯДЕР КОАГУЛЯЦИИ

Здесь мы развиваем подход предыдущего раздела, чтобы оценить момент времени нарушения закона сохранения для следующих ядер коагуляции

$$K(x, y) = \begin{cases} a(x)b(y), & x \geq y, \\ a(y)b(x), & x \leq y. \end{cases} \tag{22}$$

Уравнение характеристики, выходящей из максимальной точки x_0, в которой финитные начальные данные становятся равными нулю, принимает тогда вид

$$\frac{dx}{dt} = a(x) \int_0^\infty yb(y)c(y, t)dy,$$

так что

$$\int_{x_0}^{x} \frac{dx}{a(x)} = \int_0^t \int_0^\infty yb(y)c(y, s)dy\, ds. \tag{23}$$

Значит, если

$$\int_0^\infty \frac{dx}{a(x)} < \infty, \tag{24}$$

то найдется конечный критический момент времени $t_{cr} < \infty$, в который коагуляционный фронт $x(t)$ уходит на бесконечность, что, как показано в предыдущем разделе на феноменологическом уровне строгости, означает возникновение нарушения закона сохранения массы системы.

Если же функция $a(x)$ достаточно мала и не удовлетворяет неравенству (24), то из (23) заключаем, что критический момент времени наступает, когда правая часть (23) становится бесконечной. Например, при $b(x) = x^\beta$ критическое время наступает в момент обращения в бесконечность $(1 + \beta)$-го момента решения $N_{1+\beta}(t)$.

Важным выводом их этих наблюдений является то, что при выполнении неравенства (24) критический момент времени наступает при любой функции $b(x)$. Например, если

$$a(x) = x^{1+\varepsilon}, \quad \varepsilon > 0, \quad b(x) = \exp(-x),$$

то

$$K(x,x) = x^{1+\varepsilon}\exp(-x) \to 0, \quad x \to \infty.$$

Тем не менее, закон сохранения массы нарушается. Все ранее известные ядра, допускавшие нарушение закона сохранения массы, принимали преобладающие значения при равных аргументах, т.е. $K(x,x) \geq K(x-y,y)$, $0 \leq y \leq x$. При этом $K(x,x) \to \infty$ при $x \to \infty$. Следовательно, природа нарушения закона сохранения лежит не только в интенсивной коагуляции частиц примерно равных масс. Это наблюдение важно при анализе, например, гравитационной коагуляции, когда частицы равных масс не коагулируют.

7. ВЫВОДЫ

Получена новая дискретная модель коагуляции, являющаяся дискретной версией ранее известного непрерывного уравнения Оорта—Хулста—Сафронова.

Если ядро коагуляции $K(x,y)$ растет достаточно медленно, то закон сохранения массы справедлив для всех описанных видов коагуляции. Также имеет место закон диссипации частиц. Как обычно, изменение подынтегрального выражения $K(x,y)c(x)c(y)$ на $K(x,y)c(x)c(y) - F(x,y)c(x+y)$ приведет к учету и процессов дробления.

Показано, что уравнение Смолуховского распространяет возмущения с бесконечной скоростью. Этого недостатка лишено уравнение Оорта—Хулста—Сафронова, по которому, следовательно, можно оценить скорость коагуляционного фронта, что мы демонстрируем в ряде случаев.

Наконец, мы устанавливаем, что коагуляционный фронт уходит на бесконечность в тот же самый критический момент времени, когда происходит нарушение закона сохранения массы. Это наблюдение позволяет рассчитать возникновение нарушения закона сохранения массы для ряда важных классов ядер.

Автор благодарен В. И. Агошкову, А. Э. Аринштейну и В. П. Шутяеву за интерес к работе и полезные обсуждения.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 99-01-00336).

ПРИЛОЖЕНИЕ

Биномиальное неравенство

Докажем биномиальное неравенство (19), которое использовалось в разд. 5:

$$(x+y)^\gamma - x^\gamma - y^\gamma \geq (2^\gamma - 2)x^{\gamma/2}y^{\gamma/2}, \quad \gamma \geq 2, \quad x,y \geq 0.$$

Отметим сразу, что оно справедливо и при $0 \leq \gamma \leq 1$, а при $\gamma \leq 0$ и при $1 \leq \gamma \leq 2$ оно меняет знак.

Обозначим $x = ty$ и предположим без ограничения общности, что $x \geq y$. Тогда (19) можно записать в виде

$$r(\gamma,t) \stackrel{\text{def}}{=} (1+t)^\gamma - 1 - t^\gamma - (2^\gamma - 2)t^{\gamma/2} \geq 0, \quad \gamma \geq 2,\ t \geq 1. \tag{П.1}$$

Заметим, что

$$r(\gamma, 1) \equiv 0, \quad r'_t(\gamma, 1) \equiv 0, \quad \gamma \geq 2. \tag{П.2}$$

Дважды дифференцируя (П.1), получаем

$$r''_{tt}(\gamma, t) = \gamma(\gamma-1)\left[(1+t)^{\gamma-2} - t^{\gamma-2}\right] - \frac{1}{2}\gamma(\gamma-2)\left(2^{\gamma-1}-1\right)t^{(\gamma-4)/2}, \tag{П.3}$$

откуда устанавливаем положительность $r''_{tt}(\gamma, 1)$ при $\gamma \in [2, \infty)$. Покажем, что функция r''_{tt} возрастает по t при $\gamma \in [2, \infty)$.

Сначала рассмотрим отрезок $\gamma \in [3, 4]$. Тогда с ростом t выражение в квадратных скобках в (П.3) увеличивается, а вычитаемое в правой части (П.3) уменьшается. Значит, вторая производная r''_{tt} положительна при $t \in [1, \infty)$, $\gamma \in [3, 4]$, так что в силу (П.2) устанавливаем неотрицательность $r(\gamma, t) \geq 0$, $t \geq 1$, $\gamma \in [3, 4]$.

Для доказательства возрастания r''_{tt} по t при $\gamma \geq 4$ рассмотрим следующую производную:

$$r'''_{ttt} = \gamma(\gamma-1)(\gamma-2)\left[(1+t)^{\gamma-3} - t^{\gamma-3}\right] - \frac{1}{4}\gamma(\gamma-2)(\gamma-4)\left(2^{\gamma-1}-1\right)t^{(\gamma-6)/2}. \tag{П.4}$$

Выражение в квадратных скобках в (П.4) увеличивается с ростом t при $\gamma > 4$, а вычитаемое не возрастает при $\gamma \leq 6$. Следовательно, утверждение о возрастании функции r по t справедливо и для $\gamma \in [4, 6]$.

Аналогично, дифференцируя (П.4) необходимое число раз, устанавливаем, что

$$r(\gamma, t) \geq 0, \quad \gamma \in [3, \infty), \quad t \in [1, \infty). \tag{П.5}$$

Теперь рассмотрим полуинтервал $\gamma \in [2, 3)$, на котором функция r''_{tt} убывает по t. Покажем, однако, что она остается положительной. Из (П.3) следует, что для этого достаточно выполнения неравенства

$$v(\gamma, t) \overset{\text{def}}{=} (1+t)^{\gamma-2}t^{2-\gamma/2} - t^{\gamma/2} \geq \frac{\gamma-2}{2(\gamma-1)}\left(2^{\gamma-1}-1\right), \quad \gamma \in [2, 3), \quad t \in [1, \infty). \tag{П.6}$$

Очевидно, что (П.6) верно при $t = 1$. В неотрицательности производной $v'_t(\gamma, t)$, $t \geq 1$, можно убедиться путем замены $u = t^{-1}$, $t \geq 1$. Итак,

$$v'_t(\gamma, t) \geq 0, \quad t \geq 1, \quad \gamma \in [2, 3). \tag{П.7}$$

Из (П.5) и (П.7) и вытекает неравенство (19).

Литература

1. M. V. Smoluchowski, Physik. Z **17**, 557 (1916).
2. М. Смолуховский, в сб. *Коагуляция коллоидов,* под ред. А. И. Рабиновича, П. С. Васильева, ОНТИ (1936), стр. 7 (M. Smoluchowski, Z. Phys. Chem. **92**, 129 (1917)).
3. Г. Мюллер, в сб. *Коагуляция коллоидов*, под ред. А. И. Рабиновича, П. С. Васильева, ОНТИ (1936), стр. 74 (H. Müller, Kolloidchemische Beihefte **27**, 223 (1928)).

4. J. H. Oort and H. C. van de Hulst, Bull. Astron. Inst. Netherland **10**, 187 (1946).
5. В. С. Сафронов, *Эволюция допланетарного облака и образование Земли и планет,* Наука, Москва (1969).
6. S. Piotrowsky, Acta Astron., Ser. A **5**, 115 (1953).
7. J. S. Dohnanyi, Report TR-67-340-3 (1967).
8. В. М. Волощук, Ю. С. Седунов, *Процессы коагуляции в дисперсных системах*, Гидрометеоиздат, Ленинград (1975).
9. Л. Е. Стернин, А. А. Шрайбер, *Многофазные течения газа с частицами*, Машиностроение, Москва (1994).
10. J. W. Telford, J. Meteorol. **12**, 436 (1955).
11. S. Twomey, J. Atm. Sci. **21**, 553 (1964).
12. W. T. Scott, J. Atm. Sci. **25**, 871 (1968).
13. И. М. Васенин, В. А. Архипов, В. Г. Бутов, А. А. Глазунов, В. Ф. Трофимов, *Газовая динамика двухфазных течений в соплах*, Изд-во Томского ун-та, Томск (1986).
14. P. B. Dubovski and I. W. Stewart, Math. Meth. Appl. Sci. **19**, 571 (1996).
15. P. B. Dubovski, in Lecture Notes Series, Seoul: Seoul National Univ., Research Inst. of Math., Global Analysis Research Center (1994), Vol. 23, p. 169.
16. D. ben-Avraham, D. Considine, P. Meakin, S. Redner, and H. Takayasu, J. Phys. A.: Math. Gen. **23**, 4297 (1990).
17. А. Э. Аринштейн, С. М. Межиковский, Хим. физ. **16**, 122 (1997).
18. А. Э. Аринштейн, В. И. Гольданский, Доклады РАН **352**, 483 (1997).
19. Е. Р. Домиловский, А. А. Лушников, В. Н. Пискунов, Прикл. матем. механика **44**, 697 (1980).
20. А. А. Лушников, ДАН СССР **237**, 1122 (1977).
21. J. B. McLeod, Proc. London Math. Soc. (3) **14**, 445 (1964).
22. F. Leyvraz and H. R. Tschudi, J. Phys. A: Math. Gen. **14**, 3389 (1981).
23. M. H. Ernst, R. M. Ziff, and E. M. Hendriks, J. Coll. Interf. Sci. **97**, 266 (1984).
24. В. А. Галкин, Метеорология и гидрология **5**, 33 (1984).
25. R. M. Ziff, M. H. Ernst, and E. M. Hendriks, J. Phys. A.: Math. Gen. **16**, 2293 (1983).
26. R. M. Ziff and G. Stell, J. Chem. Phys. **73**, 3492 (1980).