

ОБ УРАВНЕНИЯХ КИНЕТИКИ АГРЕГАЦИОННЫХ ПРОЦЕССОВ В СУСПЕНЗИЯХ

А. С. Попель, С. А. Регирер, Н. Х. Шадрин

(Москва, Ленинград)

Построены обобщенные кинетические уравнения, описывающие агрегацию частиц в суспензиях с учетом процессов распада, многократных и обменных взаимодействий. Получена в общем виде система уравнений для моментов функции распределения и указан способ отыскания равновесных распределений. Рассмотрен переход к описанию систем с дискретными распределениями. Найдены некоторые точные, в том числе авто-модельные, решения предложенных кинетических уравнений.

Физические свойства многих суспензий существенно зависят от процессов объединения и распада взвешенных частиц. Эти процессы описываются специальными кинетическими уравнениями, примером которых может служить хорошо известное уравнение коагуляции капель (см. [1]). В этом уравнении учитывается только один агрегационный процесс, а именно слияние капель в результате двойных столкновений. Известны также теории, в которых принимается во внимание еще распад частиц (см., например, [2]). Однако для некоторых систем с высокой концентрацией взвешенных частиц, например для крови, где эритроциты занимают около половины объема, необходим учет более сложных взаимодействий между частицами.

Так, в концентрированной суспензии определяющую роль могут играть недвойные столкновения; для крови, в частности, они становятся существенны при концентрации эритроцитов $H \geq 5\%$ [3]. Кроме объединения частиц в агрегаты и распада последних, возможны еще обменные взаимодействия, когда в результате столкновения двух или более частиц образуются две или более частицы, не тождественные исходным¹. Если для данных условий в суспензии существует наибольший предельный размер агрегата, но допускаются столкновения произвольных частиц, то обменные взаимодействия обязательно имеют место.

Указанные явления учитываются в обобщенном кинетическом уравнении, которое строится и обсуждается ниже в п. 1—4,7. В п. 5,6 получены некоторые точные решения этого уравнения.

1. Кинетическое уравнение. Рассмотрим суспензию, представляющую собой смесь «несущей» жидкости и взвешенных частиц, которые могут образовывать агрегаты произвольной формы в результате эффективных, т. е. сопровождающихся слипанием, столкновений. Агрегаты могут распадаться под действием внешних, преимущественно гидродинамических сил или вследствие неустойчивости. Предполагается, что возможны также обменные взаимодействия.

Будем характеризовать состояние смеси функцией распределения $f(v, t, r)$ (в сокращенной записи $f(v)$), такой, что $f(v) dv$ есть ожидаемое

¹ На это обстоятельство внимание авторов обратил А. Г. Куликовский.

в единичном объеме физического пространства число агрегатов с объемами от v до $v + dv$. Интегралы

$$(1.1) \quad n = \int_0^{\infty} f(v) dv, \quad H = \int_0^{\infty} v f(v) dv$$

выражают соответственно числовую и объемную концентрации агрегатов. Средний объем агрегата определяется как

$$(1.2) \quad w = H / n$$

Основное уравнение, которому удовлетворяют функции распределения $f(v)$, имеет вид

$$(1.3) \quad \frac{df(v)}{dt} \equiv \frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{u} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} = \Gamma_k^+ - \Gamma_k^- + \Gamma_f^+ - \Gamma_f^- + \Gamma_e^+ - \Gamma_e^- - \text{div } \mathbf{q}$$

Здесь \mathbf{u} — средняя скорость смеси, $\Gamma = \Gamma(v, t, \mathbf{r})$ — скорость изменения распределения за счет агрегационных процессов, индексы k, f, e соответствуют слипанию, распаду и обмену, верхние индексы \pm — возникновению и исчезанию v -агрегатов (с объемом в окрестности v). Поток \mathbf{q} отражает диффузию агрегатов, причем интегралы

$$(1.4) \quad \mathbf{q}_n = \int_0^{\infty} \mathbf{q} dv, \quad \mathbf{q}_H = \int_0^{\infty} v \mathbf{q} dv$$

имеют смысл плотностей потока числовой и объемной концентраций.

Если $U(v)$ — средняя скорость v -агрегатов, то

$$(1.5) \quad \mathbf{q} = (\mathbf{u} - U(v)) f \mathbf{i}$$

Обозначим через $K_s(m_1, \dots, m_s) \equiv K_s(m_s | 1^s)$ вероятность образования агрегата объемом $M_s \equiv m_1 + \dots + m_s$ за счет одновременного слипания s агрегатов с объемами m_1, \dots, m_s . Функция K_s по определению учитывает и вероятность самого s -кратного столкновения. Символом $m | 1^s$ здесь и далее обозначается совокупность аргументов m_1, \dots, m_s .

Через $F_s(m | 1^s)$ обозначим плотность вероятности распада агрегата объемом M_s на s частей с объемами m_1, \dots, m_s , т. е. $F_s dm_1 \dots dm_s$ описывает вероятность одновременного образования осколков с объемами в интервалах $(m_1, m_1 + dm_1), \dots, (m_s, m_s + dm_s)$.

Наконец, через $E_{sr}(m | 1^s; p | 1^r)$, где $M_s = P_r \equiv p_1 + \dots + p_r$, $s > 1$, обозначим плотность вероятности обменного взаимодействия, заключающегося в мгновенном превращении совокупности агрегатов с объемами m_1, m_2, \dots, m_s в совокупность с объемами p_1, p_2, \dots, p_r .

Функции K_s, F_s — симметрические, тождественно равные нулю для отрицательных аргументов; функция E_{sr} обладает аналогичными свойствами по переменным m_i и p_i в отдельности. Будем предполагать, что K_s, F_s, E_{sr} могут также явно зависеть от времени t и координат \mathbf{r} .

Пользуясь введенными вероятностными функциями и учитывая их свойства, можно записать следующие выражения для Γ_k^\pm , Γ_f^\pm , Γ_e^\pm :

$$(1.6) \quad \Gamma_k^+ = \sum_{s=2}^{\infty} \frac{1}{s!} \int \dots \int K_s(m|_1^{s-1}, v - M_{s-1}) f(v - M_{s-1}) \prod_{j=1}^{s-1} f(m_j) dm_j$$

$$\Gamma_k^- = \sum_{s=2}^{\infty} \frac{1}{(s-1)!} \int \dots \int K_s(m|_1^{s-1}, v) f(v) \prod_{j=1}^{s-1} f(m_j) dm_j$$

$$(1.7) \quad \Gamma_f^+ = \sum_{s=2}^{\infty} \frac{1}{(s-1)!} \int \dots \int F_s(m|_1^{s-1}, v) f(M_{s-1} + v) \prod_{j=1}^{s-1} dm_j$$

$$\Gamma_f^- = \sum_{s=2}^{\infty} \frac{1}{s!} \int \dots \int F_s(m|_1^{s-1}, v - M_{s-1}) f(v) \prod_{j=1}^{s-1} dm_j$$

$$(1.8) \quad \Gamma_e^+ = \sum_{s=2}^{\infty} \sum_{r=2}^{\infty} \frac{1}{s! (r-1)!} \int \dots \int E_{sr}(m|_1^{s-1}, P_{r-1} + v - M_{s-1}; p|_1^{r-1}, v) \times$$

$$\times f(P_{r-1} + v - M_{s-1}) \prod_{j=1}^{s-1} f(m_j) dm_j \prod_{k=1}^{r-1} dp_k$$

$$\Gamma_e^- = \sum_{s=2}^{\infty} \sum_{r=2}^{\infty} \frac{1}{(s-1)! r!} \int \dots \int E_{sr}(m|_1^{s-1}, v; p|_1^{r-1}, M_{s-1} +$$

$$+ v - P_{r-1}) f(v) \prod_{j=1}^{s-1} f(m_j) dm_j \prod_{k=2}^{r-1} dp_k$$

Здесь и далее, если не оговорено противное, подразумевается интегрирование в пределах от 0 до ∞ по всем переменным.

Уравнение (1.3) вместе с формулами (1.6) — (1.8) и соответствующими предельными условиями определяют функцию распределения, если заданы K_s , F_s , E_{sr} и q .

В частном случае, когда

$$(1.9) \quad K_s \equiv 0 \quad (s \geq 3), \quad F_s \equiv 0 \quad (s \geq 2), \quad E_{sr} \equiv 0 \quad (s \geq 2, r \geq 2), \\ q = 0$$

из (1.3), (1.6) — (1.8) следует уравнение, полученное в [4].

2. Моменты функции распределения. Будем называть моментом порядка q интеграл

$$(2.1) \quad Q_q = \frac{1}{n} \int v^q f(v) dv$$

Умножая уравнение (2.3) на v^q и интегрируя по v от 0 до ∞ , получим после преобразований

$$(2.2) \quad \frac{d}{dt} nQ_q = \sum_{s=2}^{\infty} \frac{1}{s!} \int \dots \int K_s(m|_1^s) \left[\left(\sum_1^s m_i \right)^q - \sum_1^s m_i^q \right] \prod_{j=1}^s f(m_j) dm_j - \sum_{s=2}^{\infty} \frac{1}{s!} \int \dots \int F_s(m|_1^s) \left[\left(\sum_1^s m_i \right)^q - \sum_1^s m_i^q \right] -$$

$$\begin{aligned}
 & - \sum_1^s m_i^q \Big] f(M_s) \prod_{j=1}^s dm_j + \sum_{s=2}^{\infty} \sum_{r=2}^{\infty} \frac{1}{s!r!} \int \dots \int E_{sr}(m|_1^s; p|_1^r) \times \\
 & \times \left[\sum_2^r p_i^q - \sum_1^s m_i^q \right] \prod_{j=1}^s f(m_j) dm_j \prod_{k=1}^{r-1} dp_k - \operatorname{div} \int v^q \mathbf{q}(v) dv \\
 & (p_r = M_s - P_{r-1})
 \end{aligned}$$

Двойная сумма здесь может быть также представлена в виде

$$\begin{aligned}
 & \sum_{s=1}^{\infty} \frac{1}{s!} \int \dots \int \left[E_s^+(m|_1^s) \prod_{j=1}^s f(m_j) - E_s^-(m|_1^s) f(M_s) \right] \times \\
 & \times \left[\left(\sum_1^s m_i \right)^q - \sum_1^s m_i^q \right] \prod_{j=1}^s dm_j \\
 (2.3) \quad & E_s^+ = \sum_{r=2}^{\infty} \frac{1}{r!} \int \dots \int E_{sr}(m|_1^s; p|_1^r) \prod_{k=1}^{r-1} dp_k \\
 & E_s^- = \sum_{r=2}^{\infty} \frac{1}{r!} \int \dots \int E_{sr}(p|_1^r; m|_1^s) f(p_r) f^{-1}(P_r) \prod_{k=1}^{r-1} f(p_k) dp_k
 \end{aligned}$$

При $q = 0$ из (2.2) следует уравнение, описывающее изменение полного числа агрегатов

$$\begin{aligned}
 (2.4) \quad & \frac{dn}{dt} = \sum_{s=2}^{\infty} \frac{1-s}{s!} \int \dots \int \left[K_s(m|_1^s) \prod_{j=1}^s f(m_j) - \right. \\
 & \left. - F_s(m|_1^s) f(M_s) \right] \prod_{j=1}^s dm_j + \sum_{s=2}^{\infty} \sum_{r=2}^{\infty} \frac{r-s}{s!r!} \times \\
 & \times \int \dots \int E_{sr}(m|_1^s; p|_1^r) \prod_{j=1}^s f(m_j) dm_j \prod_{k=1}^{r-1} dp_k - \operatorname{div} \mathbf{q}_n
 \end{aligned}$$

Очевидно, что все обменные члены с $r = s$ из (2.4) выпадают, так как такие взаимодействия заведомо не изменяют числа агрегатов.

При $q = 1$ все интегральные члены в уравнении моментов (2.2) обращаются в нуль, и получается обычное уравнение диффузии

$$(2.5) \quad dH/dt = -\operatorname{div} \mathbf{q}_H$$

В частном случае, когда выполнены условия (1.9), из (2.2) следует уравнение, выведенное в работе [5].

Чтобы пояснить суть проделанных преобразований, рассмотрим, например, интеграл

$$\begin{aligned}
 (2.6) \quad & \frac{1}{s!(r-1)!} \int \dots \int v^q E_{sr}(m|_1^{s-1}, P_{r-1} + v - M_{s-1}; p|_1^{r-1}, v) \times \\
 & \times f(P_{r-1} + v - M_{s-1}) \prod_{j=1}^{s-1} f(m_j) dm_j \prod_{k=1}^{r-1} dp_k dv = \\
 & = \frac{1}{s!(r-1)!} \int \dots \int p_r^q E_{sr}(m|_1^s; p|_1^r) \prod_{i=1}^s f(m_i) dm_i \prod_{k=1}^{r-1} dp_k \\
 & (p_r = v = M_s - P_{r-1})
 \end{aligned}$$

Заменим переменную интегрирования p_l , где $1 \leq l \leq r-1$, на p_r ; тогда получим

$$(2.7) \quad \frac{1}{s!(r-1)!} \int \dots \int p_r^q E_{sr}(m|_1^s; p|_1^r) \prod_{j=1}^s f(m_j) dm_j \prod_{k=1}^{l-1} dp_k \prod_{k=l+1}^r dp_k$$

Вводя переобозначения $p_r \rightarrow p_l$, $p_l \rightarrow p_r$, найдем отсюда

$$(2.8) \quad \frac{1}{s!(r-1)!} \int \dots \int p_l^q E_{sr}(m|_1^s; p|_1^r) \prod_{j=1}^s f(m_j) dm_j \prod_{k=1}^{r-1} dp_k$$

Таким образом, исследуемый интеграл может быть представлен в виде (2.8), где $l = 1, 2, \dots, r$ (см. (2.7)). Складывая все r различных представлений, получим

$$\frac{1}{s!r!} \int \dots \int \left(\sum_1^r p_i^q \right) E_{sr}(m|_1^s; p|_1^r) \prod_{j=1}^s f(m_j) dm_j \prod_{k=1}^{r-1} dp_k$$

Вывод формулы (2.3) осуществляется так. Запишем двойную сумму в (2.2) в виде

$$\begin{aligned} & \sum_{s=2}^{\infty} \sum_{r=2}^{\infty} \frac{1}{s!r!} E_{sr}(m|_1^s; p|_1^r) \left[\left(\sum_1^s m_i \right)^q - \sum_1^s m_i^q \right] \prod_{j=1}^s f(m_j) \times \\ & \times dm_j \prod_{k=1}^{r-1} dp_k - \sum_{s=2}^{\infty} \sum_{r=2}^{\infty} \frac{1}{s!r!} \int \dots \int E_{sr}(m|_1^s; p|_1^r) \left(\left[\sum_1^r \bar{p}_i \right]^q - \right. \\ & \left. - \sum_1^r p_i^q \right) \prod_{j=1}^s f(m_j) dm_j \prod_{k=1}^{r-1} dp_k \end{aligned}$$

Во второй сумме произведем переобозначение переменных по правилу $m_j \rightarrow p_k$, $d_k \rightarrow m_j$, $s \rightarrow r$, $r \rightarrow s$ и перестановку порядков суммирования и интегрирования, что дает

$$\begin{aligned} & - \sum_{s=2}^{\infty} \sum_{r=2}^{\infty} \frac{1}{s!r!} \int \dots \int E_{rs}(p|_1^r; m|_1^s) \left[\left(\sum_1^s m_i \right)^q - \sum_1^s m_i^q \right] \times \\ & \times \prod_{k=1}^r f(p_k) dp_k \sum_{j=1}^{s-1} dm_j \end{aligned}$$

Переходя к переменной интегрирования m_s вместо p_r с учетом равенства $M_s = P_r$, получим

$$\begin{aligned} & - \sum_{s=2}^{\infty} \sum_{r=2}^{\infty} \frac{1}{s!r!} \int \dots \int E_{rs}(p|_1^r; m|_1^s) \left[\left(\sum_1^s m_i \right)^q - \sum_1^s m_i^q \right] \times \\ & \times f(p_r) \sum_{k=1}^{r-1} f(p_k) dp_k \prod_{j=1}^s dm_j \end{aligned}$$

Дальнейший переход к (2.3) очевиден.

3. Агрегационное равновесие. Когда диффузия отсутствует, уравнение (2.2) с учетом (2.3) можно представить в следующем виде:

$$(3.1) \quad \begin{aligned} \frac{d}{dt} nQ_q &= \sum_{s=2}^{\infty} \frac{1}{s!} \int \dots \int \left[K_s^*(m|_1^s) \prod_{j=1}^s f(m_j) - F_s^*(m|_1^s) f(M_s) \right] \times \\ & \times \left[\left(\sum_1^s m_i \right)^q - \sum_1^s m_i^q \right] \prod_{j=1}^s dm_j \\ K_s^* &= K_s + E_s^+, \quad F_s^* = F_s + E_s^- \end{aligned}$$

Рассмотрим систему, в которой существуют взаимодействия только одной кратности l

$$(3.2) \quad K_s \equiv 0 \quad (s \neq l), \quad F_s \equiv 0 \quad (s \neq l), \quad E_{sr} \equiv 0 \quad (s \neq l, \quad r \neq l)$$

Для такой системы из (3.1) следует

$$(3.3) \quad \frac{d}{dt} nQ_q = \frac{1}{H} \int \dots \int \left[K_l^*(m|_1^l) \prod_{j=1}^l f(m_j) - F_l^*(m|_1^l) f(M_l) \right] \times \\ \times \left[\left(\sum_1^l m_i \right)^q - \sum_1^l m_i^q \right] \prod_{j=1}^l dm_j$$

Справедливо следующее утверждение, проверяемое прямыми вычислениями: если функциональное уравнение ¹

$$(3.4) \quad K_l^*(m|_1^l) \prod_{j=1}^l f(m_j) - F_l^*(m|_1^l) f(M_l) = 0$$

имеет решения, такие, что $df/dt = 0$, то эти решения являются одновременно решениями исходного кинетического уравнения (1.3) для частного случая (3.2).

Таким образом, есть возможность находить равновесные распределения и исследовать условия их существования, не прибегая к решению исходного кинетического уравнения в форме (1.3)².

Заметим, однако, что остаются открытыми вопросы о том, исчерпывают ли решения функционального уравнения (3.4) все допустимые для данной системы состояния агрегационного равновесия, и равносильно ли обращение в нуль всех производных dnQ_q/dt равновесию в смысле df/dt .

Если в системе происходят одновременно взаимодействия различных кратностей, то равновесные состояния также возможны, но для их отыскания не удастся указать аналогичного примера.

4. Дискретные системы. Предположим, что в суспензии существуют только частицы, объемы которых принадлежат последовательности $v|_1 = v_1, v_2, \dots, v_k, \dots, \dots, (v_k > v_{k-1})$, причем $v_i + v_j$ при любых i, j также принадлежит к $v|_1$. Функция распределения имеет в этом случае вид

$$(4.1) \quad f(v) = \sum_{i=1}^{\infty} n_i \delta(v - v_i)$$

Здесь n_i — числовая концентрация агрегатов с объемом v_i , $H_i = n_i v_i$ — их объемная концентрация. При этом

$$(4.2) \quad n = \sum_1^{\infty} n_i, \quad H = \sum_1^{\infty} n_i v_i, \quad nQ_q = \sum_1^{\infty} n_i (v_i)^q$$

Для существования дискретного распределения необходимо, чтобы

$$F_s(m|_1^s) = 0, \quad E_{sr}(m|_1^s; p|_1^r) = 0$$

¹ Теория таких уравнений и эффективные методы их решения изложены в монографии [6].

² При большей конкретизации системы уравнение (3.4) допускает и термодинамическое истолкование (см. [7]).

если хотя бы одна из величин m_i или p_i соответственно не принадлежит последовательности $v |_1$. Функции F_s по m_i и E_{sr} по p_i ведут себя как δ -функции порядка $s - 1$ и $r - 1$ соответственно, например

$$(4.3) \quad F_s(m |_1^s) = \frac{1}{s} \Psi_s(m |_1^s) \sum_{(k)} \sum_{j=1}^s \delta^{-1}(m_j - v_{l_j}^{(k)}) \prod_{i=1}^s \delta(m_i - v_{l_i}^{(k)})$$

Здесь Ψ_s — симметрическая регулярная функция, равная нулю для отрицательных аргументов, $v_{l_1}^{(k)}, v_{l_2}^{(k)}, \dots, v_{l_s}^{(k)}$ — k -я произвольно выбранная совокупность s членов из $v |_1$, причем совокупности k, k' считаются различными, если $v_{l_i}^{(k)} \neq v_{l_i}^{(k')}$ хотя бы для одного значения i . Внешнее суммирование в (4.3) распространено на все различные совокупности.

Заметим теперь, что при подсчете величин Γ (см. п. 1) следовало, вообще говоря, иметь в виду, что с точки зрения количества образовавшихся или исчезнувших v -агрегатов результат слияния или распада зависит от того, сколько участников этого акта имеют объем v . Кроме того, при интегрировании в формулах для Γ многократно учитываются элементы пространства объемов, физически тождественные. Факториальные множители перед интегралами точно корректируют подсчет только в точках, где все аргументы интегрируемых функций различны. Поэтому в формулах (1.6) — (1.8) следовало бы вместо K_s, F_s, E_{sr} использовать функции

$$(4.4) \quad \begin{aligned} K_s^*(m |_1^s) &= K_s(m |_1^s) \Theta(m |_1^s), \quad F_s^*(m |_1^s) = F_s(m |_1^s) \Theta(m |_1^s) \\ E_{sr}^*(m |_1^s; p |_1^r) &= E_{sr}(m |_1^s; p |_1^r) \Theta(m |_1^s) \Theta(|p|_1^r) \Theta(m |_1^s) = \\ &= s! \psi^{-1}(m |_1^s) \end{aligned}$$

где $\psi(m |_1^s)$ — число физически различных перестановок в последовательности $m |_1^s$. Можно доказать, используя элементарные комбинаторные соображения, что введение этих функций полностью учитывает оба отмеченных выше обстоятельства.

В пространстве N измерений функция $\Theta(m |_1^N)$ отлична от единицы на многообразии не более $N - 1$ измерений, поэтому для произвольных ограниченных функций

$$\int \dots \int [\Theta(m |_1^N) - 1] A(m |_1^N) \prod_{j=1}^N dm_j = 0$$

Благодаря этому свойству отсутствие поправочного множителя Θ никак не сказывается в исходном кинетическом уравнении до тех пор, пока стоящие под интегралами функции распределения и характеристики взаимодействий ограничены. Однако учет функций Θ становится необходимым при переходе к описанию дискретных систем с распределениями типа (4.1), когда следует формально полагать

$$\int \dots \int [\Theta(m |_1^N) - 1] \delta(m |_1^N - m' |_1^N) \prod_{j=1}^N dm_j = \Theta(m' |_1^N) - 1$$

Правая часть здесь, очевидно, не всегда равна нулю.

Эти соображения не являются новыми по существу, однако в литературе они не сформулированы явно и во многих работах не используются или используются только для некоторых, например, распадных членов кинетического уравнения (см., например, [8]).

Таким образом, для перехода к уравнениям дискретной системы нужно в (1.6) — (1.8) ввести K_s^*, F_s^*, E_{sr}^* вместо K_s, F_s, E_{sr} и затем выполнить интегрирование уравнения (1.3)

$$(4.5) \quad \int_{v_i - \alpha}^{v_i + \alpha} \frac{df}{dt} dv = \int_{v_i - \alpha}^{v_i + \alpha} [\Gamma_k^+ - \Gamma_k^- + \Gamma_f^+ - \Gamma_f^- + \Gamma_e^+ - \Gamma_e^- - \text{div } \mathbf{q}] dv$$

Здесь α определено неравенствами

$$v_{i-1} < v_i - \alpha < v_i < v_i + \alpha < v_{i+1}$$

Общий вид получающихся уравнений весьма громоздок, поэтому ограничимся примером для системы с двойными взаимодействиями (1.9) и агрегатами, образованными из одинаковых «элементарных» частиц. Полагая

$$v_i = iw_0, \Theta(v_i, v_j) = 1 + \delta_{ij}$$

$$F_2(m_1, m_2) = \frac{1}{2} \Psi(m_1, m_2) \sum_{i,j} [\delta(m_1 - v_i) + \delta(m_2 - v_j)]$$

$$E_{22}(m_1, m_2; p_1, p_2) = \frac{1}{2} \varepsilon(m_1, m_2; p_1, p_2) \sum_{i,j} [\delta(p_1 - v_i) + \delta(p_2 - v_j)]$$

получим

$$(4.6) \quad \frac{dn_j}{dt} = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{j-1} n_k n_{j-k} \alpha_{k,j-k} - n_j \sum_{k=1}^{\infty} n_k \alpha_{k,j} +$$

$$+ \sum_{k=j+1}^{\infty} n_k \beta_{k-j,j} - \frac{1}{2} n_j \beta_j + \frac{1}{2} \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{k=1}^{\infty} n_k n_l \gamma_{l,k,l+k-j,j} -$$

$$- \frac{1}{2} n_j \sum_{l=1}^{\infty} n_l \gamma_{l,j} - \text{div } \mathbf{q}_j$$

$$\alpha_{k,l} = K_2(v_k, v_l) (1 + \delta_{kl}), \quad \beta_{kl} = \Psi(v_k, v_l) (1 + \delta_{kl})$$

$$\beta_j = \sum_{i=1}^{j-1} \beta_{i,j-1}$$

$$\gamma_{k,l,i,j} = \varepsilon(v_k, v_l; v_i, v_j) (1 + \delta_{kl}) (1 + \delta_{ij}), \quad \gamma_{l,j} = \sum_{i=1}^{l+j-1} \gamma_{l,j,l+i-j,i}$$

При $\mathbf{q}_j = 0$, $\beta_{k,l} = 0$, $\gamma_{k,l,i,j} = 0$ —отсюда получаются классические уравнения Смолуховского [9]; при \mathbf{q}_j , $\alpha_{k,l}$, $\beta_{k,l}$, отличных от нуля, и $\gamma_{k,l,i,j} = 0$ из (4.6) следуют уравнения, предлагавшиеся в [2,8].

5. Точные решения. Рассмотрим теперь некоторые возможности получения точных решений кинетического уравнения (1.3) или моментных уравнений (2.2), ограничиваясь пространственно однородной задачей об агрегации при отсутствии распадов, обменных взаимодействий и диффузии, т. е. задачей, наиболее подробно изученной для двойных столкновений. В случае столкновений кратности l из (1.3), (1.4) получаем

$$(5.1) \quad \frac{df}{dt} = \frac{1}{l!} \int \dots \int [K_l(m|_1^{l-1}, v - M_{l-1}) f(v - M_{l-1}) -$$

$$- l K_l(m|_1^{l-1}, v) f(v)] \prod_{j=1}^{l-1} f(m_j) dm_j$$

$$(5.2) \quad \frac{dn}{dt} = \frac{1-l}{l!} \int \dots \int K_l(m|_1^l) \prod_{j=1}^l f(m_j) dm_j$$

Заметим предварительно, что при целых $\alpha_1, \alpha_2, \dots$, справедливы следующие равенства:

$$\int \dots \int m_1^{\alpha_1} m_2^{\alpha_2} \dots m_{s-1}^{\alpha_{s-1}} \eta(v - M_{s-1}) (v - M_{s-1})^{\alpha_s} e^{-pv} f(v - M_{s-1}) \prod_{j=1}^{s-1} f(m_j) dm_j dv = \prod_{j=1}^s (-1)^{\alpha_j} \frac{\partial^{\alpha_j} \varphi}{\partial p^{\alpha_j}}$$

$$\int \dots \int m_1^{\alpha_1} m_2^{\alpha_2} \dots m_{s-1}^{\alpha_{s-1}} v^{\alpha_s} e^{-pv} \prod_{j=1}^{s-1} f(m_j) dm_j f(v) dv = \left[\prod_{j=1}^{s-1} (-1)^{\alpha_j} \frac{\partial^{\alpha_j} \varphi}{\partial p^{\alpha_j}} \right] (-1)^{\alpha_s} \frac{\partial^{\alpha_s} \varphi}{\partial p^{\alpha_s}}, \quad \varphi(p) = \int_0^{\infty} e^{-pv} f(v) dv$$

$$\eta(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ 1, & x \geq 0 \end{cases}$$

Поэтому для любых полиномиальных функций K_l (равных нулю при отрицательных аргументах), применяя к исходному уравнению (1.3) (при $q = 0, F_s = 0, E_{sr} = 0$) преобразование Лапласа по переменной v , приходим к уравнению относительно φ , которое по времени имеет первый порядок, а по переменной p — порядок, равный наивысшей степени переменной m_i в K_l ($m_{|1}^l$). В коэффициенты уравнения при этом входят заранее неизвестные значения производных от φ по p при $p = 0$, т. е. моменты функции распределения порядка, не превышающего порядок уравнения. Положив в уравнении $p \rightarrow 0$, получим дополнительное соотношение, связывающее моменты различных порядков, но его недостаточно, вообще говоря, для определения всех коэффициентов. Очевидно, что уравнение относительно φ и дополнительное соотношение образуют замкнутую систему в том и только в том случае, когда уравнение имеет первый порядок по p . В самом деле, при этом получится система, содержащая только n , φ и H , где H определено начальными данными. Отсюда следует, что указанная процедура может быть эффективна, если K_l есть функция, линейная по каждому из m_i в отдельности, т. е. выражается суммой элементарных симметрических многочленов

$$(5.3) \quad K_l = K_{l0} + K_{l1} \sum_1^l m_i + K_{l2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ j \neq i}}^l m_i m_j + \dots + K_{ll} \prod_1^l m_i$$

При K_{lk} здесь в качестве множителя стоит сумма C_l^k различных произведений.

Очевидно, далее, что интегралы вида

$$\int \dots \int m_1^{\alpha_1} m_2^{\alpha_2} \dots m_s^{\alpha_s} \left[\left(\sum_1^s m_i \right)^q - \sum_1^s m_i^q \right] \prod_{j=1}^s f(m_j) dm_j$$

выражаются через моменты функции распределения порядка не выше $q - 1 + \max \alpha_i$, когда $q > 0$, и не выше $\max \alpha_i$, когда $q = 0$. Поэтому после подстановки (5.3) ($\max \alpha_i = 1$) в уравнение моментов (2.2) полу-

чается система незацепляющихся уравнений, решаемых последовательно. Все эти соображения легко обобщаются на случай, когда в системе происходят столкновения различных кратностей.

В частности, уравнение для числовой концентрации агрегатов принимает следующий вид:

$$(5.4) \quad \frac{dn}{dt} = \sum_{s=1}^{\infty} \frac{1-s}{s!} \sum_{i=0}^s C_s^i K_{si} n^{s-i} H^i$$

Примеры. В случае столкновений кратности l и $K_l = K_{l_0} = \text{const}$ из (5.4) находим

$$(5.5) \quad \frac{dn}{dt} = -\frac{l-1}{l!} K_{l_0} n^l$$

Из уравнения (1.3), применяя преобразование Лапласа по v , получаем уравнение для φ , при $p \rightarrow 0$ переходящее в (5.5), так как $\varphi(0, t) \rightarrow n(t)$

$$\frac{1}{K_{l_0}} \frac{d\varphi}{dt} = \frac{1}{l!} \varphi^l - \frac{1}{(l-1)!} \varphi n^{l-1}$$

Переходя к переменным $\tau = (n_0 - n) / n_0$, $\psi = \varphi (n / n_0)^{-l/(l-1)}$, $n_0 = n(0)$, откуда имеем

$$\frac{d\psi}{d\tau} = \psi^l \frac{1}{(l-1) n_0^{l-1}}$$

Следовательно

$$\frac{n}{n_0} = \left[1 + \frac{(l-1)^2}{l!} K_{l_0} n_0^{l-1} t \right]^{-1/(l-1)}$$

$$\varphi = \left(\frac{n}{n_0} \right)^{l/(l-1)} \varphi_0(p) \left[1 - \left(1 - \frac{n}{n_0} \right) \frac{\varphi_0^{l-1}}{n_0^{l-1}} \right]^{-1/(l-1)}$$

При начальном распределении $f_0 = A v^{\nu-1} e^{-av}$, где $\nu = (l-1)^{-1}$, $a = \nu n_0 / H$, $A = n_0 a^\nu \Gamma^{-1}(\nu)$, после выполнения обратного преобразования получим

$$f = A v^{\nu-1} \left(\frac{n}{n_0} \right)^{1+\nu} \exp \left(-\frac{avn}{n_0} \right)$$

В частном случае двойных столкновений ($l = 2$) это решение переходит в полученное ранее [10,11].

В качестве следующего примера возьмем случай $K_l = K_{ll} \Sigma m_i$, $K_{ll} = \text{const}$ при том же начальном распределении, что и выше. Из (5.4) и (1.3) для φ , n получаем систему

$$(5.6) \quad \frac{dn}{dt} = -\frac{K_{ll}}{(l-2)!} H n^{l-1}, \quad \frac{1}{K_{ll}} \frac{\partial \varphi}{\partial t} = -\frac{1}{l!} \frac{\partial \varphi^l}{\partial p} -$$

$$-\frac{1}{(l-1)!} \left[(l-1) H n^{l-2} \varphi - n^{l-1} \frac{\partial \varphi}{\partial p} \right]$$

Из первого уравнения

$$\frac{n}{n_0} = \left[1 + \frac{K_{ll} H t n_0^{l-2}}{(l-3)!} \right]^{1/(2-l)} \quad (l > 2)$$

В переменных $\tau = (n_0 - n) / n_0$, $\Phi = \varphi / n$ из второго уравнения следует

$$(5.7) \quad \frac{\partial \Phi}{\partial \tau} + a(\Phi^{l-1} - 1) \frac{\partial \Phi}{\partial p} = 0$$

С учетом начального условия

$$\Phi|_{\tau=0} = A\Gamma(v) \frac{1}{(p+a)^v}$$

решение (5.7) можно представить в неявном виде

$$p = a\tau(\Phi^{l-1} - 1) + \left[\frac{A\Gamma(v)}{\Phi v_0} \right]^{l-1} - a$$

Отсюда, после разрешения относительно Φ и обратного преобразования

$$f = \frac{n_0(1-\tau)^v}{v} \left(\frac{c}{a\tau} \right)^{v/2} e^{-a(1+\tau)v} I_v(2v\sqrt{ac\tau}), \quad c = [A\Gamma(v) n_0^{-1}]^{1/v}$$

$$\tau = 1 - \left[1 + \frac{K_{ll} H t n_0^{l-2}}{(l-3)!} \right]^{1/(2-l)}$$

Частный случай (5.6) при $l = 2$ ранее был исследован в статье [12].

Третий пример — случай $K_l = K_{li} \sum m_{j_1} m_{j_2} \dots m_{j_i}$ — используем, чтобы проиллюстрировать структуру моментных уравнений. Представляя (2.2) в виде

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} n Q_q &= \frac{K_{li}}{l!} \int \dots \int \left(\sum_{(j)} m_{j_1} m_{j_2} \dots m_{j_i} \right) \left(\sum_{(r)} P(r | i^l) \times \right. \\ &\times m_1^{r_1} m_2^{r_2} \dots m_l^{r_l} \left. \right) \prod_{j=1}^l f(m_j) dm_j \end{aligned}$$

легко видеть, что в общем случае правая часть здесь выражается произведениями различных моментов. Для $q \geq 2$

$$\frac{d}{dt} n Q_q = \frac{K_{li}}{l!} n^l \sum_{(\alpha)} \beta_q Q_1^{\alpha_1} Q_2^{\alpha_2} \dots Q_q^{\alpha_q}, \quad \beta = \beta(\alpha_1, \dots, \alpha_q)$$

причем суммирование в правой части распространяется на все различные совокупности целых чисел α_k , такие, что

$$\alpha_1 + \alpha_2 + \dots + \alpha_q \leq l, \quad 1 \cdot \alpha_1 + 2 \cdot \alpha_2 + \dots + q \alpha_q = i + q$$

Определение коэффициентов β представляет собой весьма громоздкую комбинаторную задачу. В частном случае $i = l$ имеем, например

$$\frac{dn Q_2}{dt} = \frac{K_{ll} n^l}{(l-2)!} Q_1^{l-2} Q_2^2$$

$$\frac{dn Q_3}{dt} = \frac{3K_{ll} n^l}{(l-2)!} [Q_1^{l-2} Q_2 Q_3 + (l-2) Q_1^{l-3} Q_2^3]$$

$$\frac{dn Q_4}{dt} = \frac{K_{ll} n^l}{(l-2)!} [4Q_1^{l-2} Q_2 Q_4 + 3Q_1^{l-2} Q_3^2 + 18(l-2) Q_1^{l-3} Q_2^2 Q_3]$$

6. Автомодельные решения. Пусть диффузия отсутствует, а все взаимодействия характеризуются однородными функциями, т. е. $q = 0$ и

$$(6.1) \quad K_s(\alpha m |_1^s) = \alpha^{\mu_s} K_s(m |_1^s), \quad F_s(\alpha m |_1^s) = \alpha^{\nu_s} F_s(m |_1^s) \\ E_{sr}(\alpha m |_1^s; \alpha p |_1^r) = \alpha^{\eta_{sr}} E_{sr}(m |_1^s; p |_1^r)$$

Тогда в пространственно однородном случае исходное кинетическое уравнение (1.3) имеет автомодельные решения вида

$$(6.2) \quad f(v, t) = g(t) \psi(V), \quad V = v / h(t)$$

При этом

$$f(v, 0) = g(0) \psi\left(\frac{v}{h(0)}\right)$$

и, следовательно, вид функции $\psi(V)$ предопределен начальными данными. Как будет показано ниже, решение вида (6.2) существует при специальных условиях, налагаемых на K_s , F_s , E_{sr} и начальные распределения.

Подставляя (6.2) в (1.1), находим

$$(6.3) \quad n = ghC_0, \quad H = gh^2C_1$$

где C_0, C_1 — произвольные постоянные. Отсюда

$$(6.4) \quad g = n^2 \frac{C_1}{HC_0^2}, \quad h = \frac{H}{n} \frac{C_0}{C_1}$$

Используя выражения (6.1), (6.2), из (1.3) получаем

$$(6.5) \quad \frac{dg}{dt} \psi(V) - \frac{\xi}{h} \frac{dh}{dt} V \frac{d\psi}{dV} = \sum_{s=2}^{\infty} \frac{1}{s!} h^{\mu_s + s - 1} g^s (\gamma_{ks}^+ - s\gamma_{ks}^-) + \\ + \sum_{s=2}^{\infty} \frac{1}{s!} h^{\nu_s + s - 1} g (s\gamma_{fs}^+ - \gamma_{fs}^-) + \sum_{s=2}^{\infty} \sum_{r=2}^{\infty} \frac{1}{s! r!} h^{\eta_{sr} + s + r - 2} g^s (r\gamma_{esr}^+ - s\gamma_{esr}^-)$$

$$(6.6) \quad \frac{dn}{dt} = \sum_{s=2}^{\infty} \frac{1-s}{s!} (h^{\mu_s + s} g^s \gamma_{ks} - h^{\nu_s + s} g \gamma_{fs}) + \\ + \sum_{s=2}^{\infty} \sum_{r=2}^{\infty} \frac{r-s}{s! r!} h^{\eta_{sr} + s + r - 1} g^s \gamma_{esr}$$

Здесь

$$(6.7) \quad \gamma_{ks}^+(V) = \int \dots \int K_s(\xi |_1^{s-1}, V - \sum_1^{s-1} \xi_i) \psi(V - \sum_1^{s-1} \xi_i) \prod_{j=1}^{s-1} \psi(\xi_j) d\xi_j \\ \gamma_{ks}^-(V) = \int \dots \int K_s(\xi |_1^{s-1}, V) \psi(V) \prod_{j=1}^{s-1} \psi(\xi_j) d\xi_j \\ \gamma_{fs}^+(V) = \int \dots \int F_s(\xi |_1^{s-1}, V) \psi(V + \sum_1^{s-1} \xi_i) \prod_{j=1}^{s-1} d\xi_j \\ \gamma_{fs}^-(V) = \int \dots \int F_s(\xi |_1^{s-1}, V - \sum_1^{s-1} \xi_i) \psi(V) \prod_{j=1}^{s-1} d\xi_j \\ \gamma_{esr}^+(V) = \int \dots \int E_{sr}(\xi |_1^{s-1}, \sum_1^{r-1} \zeta_i + V - \sum_1^{s-1} \xi_i; \zeta |_1^{r-1}, V) \times$$

$$\begin{aligned} & \times \psi \left(\sum_1^{r-1} \zeta_i + V - \sum_1^{s-1} \xi_i \right) \prod_{j=1}^{s-1} \psi(\xi_j) d\xi_j \prod_{k=1}^{r-1} d\zeta_k \\ \gamma_{esr}^-(V) &= \int \dots \int E_{sr} \left(\xi |_1^{s-1}, V; \zeta |_1^{r-1}, \sum_1^{s-1} \xi_i + V - \sum_1^{r-1} \zeta_i \right) \times \\ & \times \psi(V) \prod_{j=1}^{s-1} \psi(\xi_j) d\xi_j \prod_{k=1}^{r-1} d\zeta_k \\ \gamma_{ks} &= \int \dots \int K_s(\xi |_1^s) \prod_{j=1}^s \psi(\xi_j) d\xi_j, \quad \gamma_{fs} = \int \dots \int F_s(\xi |_1^s) \psi \left(\sum_1^s \xi_i \right) \prod_{j=1}^s d\xi_j, \\ \gamma_{esr} &= \int \dots \int E_{sr}(\xi |_1^s; \zeta |_1^r) \prod_{j=1}^s \psi(\xi_j) d\xi_j \prod_{k=1}^r d\zeta_k \end{aligned}$$

Предположим, что величины (6.7) не зависят от времени и потребуем, чтобы зависящие от t коэффициенты в правой части (6.5) были пропорциональны n^β ; тогда коэффициенты в (6.6) будут пропорциональны $n^{\beta-1}$. Число β оказывается связанным со степенями однородности функций в (6.1) соотношениями

$$\mu_s = s + 1 - \beta, \quad \nu_s = 3 - s - \beta, \quad \eta_{sr} = s - r + 2 - \beta$$

что возможно при $\mu_s = \nu_s + 2(s - 1) = \eta_{sr} + r - 1$.

С учетом (6.4) преобразуем (6.5), (6.6) к виду

$$\begin{aligned} (6.8) \quad \frac{dn}{dt} \frac{C_1}{HC_0^2} \left[2\psi + V \frac{d\psi}{dV} \right] &= n^{\beta-1} \left(\frac{HC_0}{C_1} \right)^{-\beta} \left\{ \sum_{s=2}^{\infty} \left(\frac{H}{C_1} \right)^s \times \right. \\ & \times \frac{1}{s!} (\gamma_{ks}^+ - s\gamma_{ks}^-) + \sum_{s=2}^{\infty} \frac{1}{s!} \left(\frac{H}{C_1} \right) (s\gamma_{fs}^+ - \gamma_{fs}^-) + \\ & \left. + \sum_{s=2}^{\infty} \sum_{r=2}^{\infty} \frac{1}{s! r!} \left(\frac{H}{C_1} \right)^s (r\gamma_{esr}^+ - s\gamma_{esr}^-) \right\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} (6.9) \quad \frac{dn}{dt} &= n^{\beta-1} \left(\frac{HC_0}{C_1} \right)^{1-\beta} \left\{ \sum_{s=2}^{\infty} \frac{1-s}{s!} \left[\left(\frac{H}{C_1} \right)^s \gamma_{ks} - \right. \right. \\ & \left. \left. - \frac{H}{C_1} \gamma_{fs} \right] + \sum_{s=2}^{\infty} \sum_{r=2}^{\infty} \left(\frac{H}{C_1} \right)^s \frac{r-s}{s! r!} \gamma_{esr} \right\} \end{aligned}$$

Очевидно, что в результате исключения отсюда n получим интегродифференциальное уравнение для $\psi(V)$, решения которого — допустимые начальные распределения. Само автомодельное решение имеет вид (6.2), где g, h выражены через n , согласно (6.4), а n удовлетворяет уравнению (6.9).

Решение, совпадающее с рассмотренным для частного случая (1.9), было ранее получено в статьях [13, 14].

Заметим, что автомодельные решения существуют и при наличии диффузии со специальным видом потока q . Точные решения п. 5,6 при помощи преобразования временной переменной обобщаются также на случай, когда функции K_s , F_s , E_{sr} зависят не только от m_i , p_i , а содержат множитель (один и тот же), явно содержащий время.

Пространственно неоднородный случай требует специального рассмотрения; однако в практически интересном случае, когда

$$u = u(t, y) e_x, \quad f = f(v, t, y), \quad K_s = K_s(m |r^s; t, y) \\ F_s = F_s(m |r^s; t, y), \quad E_{sr} = E_{sr}(m |r^s; p |r^r; t, y)$$

все рассуждения п. 5,6 сохраняют силу, а координата y входит в решения как параметр.

7. Заключительные замечания. Более детальное описание суспензии достигалось бы введением функции распределения $f^*(v, t, r, \xi)$, где ξ — скорость агрегата. Тогда

$$f = \int f^* d\xi, \quad q = \int (\bar{u} - \xi) f^* d\xi$$

Функции Γ_k^\pm , Γ_f^\pm , Γ_e^\pm , вообще говоря, связаны с интегралом столкновений в уравнении для f^* . Вид этого уравнения неизвестен, и имеющихся сведений о взаимодействии частиц концентрированной суспензии между собой и с несущей жидкостью недостаточно для его построения. По-видимому, для f^* вообще не существует кинетического уравнения в обычном смысле, так как время динамического взаимодействия агрегатов по порядку величины совпадает с временем релаксации функции f^* . Однако, когда время агрегационного взаимодействия много меньше релаксационного времени для f , возможно непосредственное построение уравнений типа (1.3) для f .

Аналогичное рассмотрение может быть проведено для суспензий, содержащих агрегаты нескольких различных типов, путем введения системы функций распределения $f_\alpha(v, t, r)$, $\alpha = 1, 2, \dots$ и включения в правые части кинетических уравнений членов, соответствующих взаимодействиям с превращениями одного типа в другой.

Поступила 2-I 1974

ЛИТЕРАТУРА

1. Фукс Н. А. Механика аэрозолей. М., Изд-во АН СССР, 1955.
2. Joly M. Proc. 4th Internat. Congress Rheol., Brown University, Providence, 1963, pt. 4, N. Y., J. Wiley and Sons, 1965.
3. Голдсмит Г. Микрореология суспензий эритроцитов человека. Механика. Сб. перев., 1973, № 6.
4. Müller H. Zur allgemeinen Theorie der raschen Koagulation. Die Koagulation von Stäbchen — und Blättchenkolloiden; die Theorie beliebig polydisperser Systeme und der strömungskogulation. Kolloidchem. Beihefte, 1928, Bd. 27, H 6—12, S. 223—250. (Рус. перев.: В сб.: Коагуляция коллоидов. М., ОНТИ, 1936).
5. Енукашвили И. М. О решении кинетического уравнения коагуляции. Изв. АН СССР. Сер. геофиз., 1964, № 10.
6. Aczél J. Vorlesungen über Funktionalgleichungen und ihre Anwendungen. Berlin, Deutsch. Verl. Wissensch., 1961.
7. Мартынов Г. А., Муллер В. М. Уравнения кинетики коагуляции с учетом распада образующихся агрегатов. Докл. АН СССР, 1972, т. 207, № 5.
8. Мартынов Г. А., Муллер В. М. К теории устойчивости лиофобных коллоидов. В сб.: Поверхностные силы в тонких пленках и дисперсных системах. М., «Наука», 1972.
9. Smoluchowski M. Versuch einer mathematischen Theorie der koagulationskinetic kolloid Lösungen. Z. Phys. Chem., 1918, Bd 92, H 2, S. 129—168.
10. Туницкий Н. О коагуляции дисперсных систем. ЖЭТФ, 1938, т. 8, № 4.
11. Пшенай-Северин С. В. Распределение частиц дисперсной системы по размерам в процессе коагуляции. Докл. АН СССР, 1954, т. 94, № 5.
12. Головин А. М. Решение уравнения коагуляции облачных капель в восходящем потоке воздуха. Изв. АН СССР. Сер. геофиз., 1963, № 5.
13. Мартынов Г. А., Баканов С. Н. О решении кинетического уравнения коагуляции. В сб.: Исследование в области поверхностных сил. М., Изд-во АН СССР, 1961.
14. Lushnikov A. A. Evolution of coagulating systems. J. Coll. Interface. Sci., 1973, vol. 45, No. 3, p. 547—556.