Прикладная математика и механика. Том 44, вып. 4, 1980

УДК 532.529

СТАЦИОНАРНЫЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЧАСТИЦ ПО РАЗМЕРАМ В КОНЕЧНЫХ КОАГУЛИРУЮЩИХ СИСТЕМАХ С РАСПАДАМИ

Е. Р. Домиловский, А. А. Лушников, В. Н. Пискунов

(Москва)

Рассматривается задача о стационарном распределении по размерам частиц дисперсной фазы, подверженных процессам коагуляции и распада. Получены аналитические выражения для среднего числа частиц произвольной массы в стационарном распределении. Рассмотрен предельный переход к бесконечной системе.

В механике аэрозолей одним из основных факторов, определяющих распределение частиц по размерам, является процесс коагуляции частиц дисперсной фазы в результате их столкновений. С коагуляцией часто конкурирует процесс дробления или распада частиц, обусловленный каким-либо конкретным механизмом (например, разрушение частиц в турбулентных пульсациях воздушной среды, неустойчивость капель относительно деформации их поверхности [1, 2]). Обобщение кинетического уравнения коагуляции на случай систем с распадами впервые было проведено в работе [3]. В работе [4] построена модель образования осадков из теплого облака с учетом процессов распада капель; в работе [5] сделана попытка выяснить характерный вид стационарных спектров частиц в системах с коагуляцией и распадами.

Вероятностный подход к рассмотрению процессов коагуляции в дисперсных системах сформулирован в работах [6,7]; в рамках этого подхода коагуляция рассматривается как марковский процесс. В работах [8,9] проведено численное моделирование процессов коагуляции методом Монте-Карло. Этот подход позволил получить ряд результатов, не вытекающих из теории Смолуховского, например появление суперчастиц [10]. К настоящему времени аналитически решено лишь небольшое число вероятностных задач теории коагуляции [7].

1. На основе теории Смолуховского (см., например, [1]) рассматривается кинетика коагулирующих систем с учетом распада частиц, Состояние коагулирующей системы в каждый момент времени описывается средним спектром масс $c_g(t)$, где $c_g(t)$ — концентрация частиц массы g в момент времени t (каждая частица считается составленной из g мономеров единичной массы). Эволюция спектра в результате слияния частиц при соударениях и их распада описывается кинетическим уравнением вида

$$\frac{dc_g}{dt} = \frac{1}{2}\sum_{n=1}^{g-1} K(g-n, n)\, c_{g-n} c_n - c_g \sum_{n=1}^{\infty} K(g, n)\, c_n + \sum_{n=1}^{\infty}(1+\delta_{g,n})\, L(g, n)\, c_{g+n} - \frac{1}{2} c_g \sum_{n=1}^{g-1}(1+\delta_{n,\, g-n})\, L(g-n, n) \tag{1.1}$$

Здесь $K(g, n)$ — вероятность коагуляционного акта в единицу времени в единице объема, $L(g, n)$ — вероятность распада частицы, $\delta_{g,n}$ — символ

Кронекера. Рассматривается частный случай, когда L и K связаны соотношением

$$(1 + \delta_{l,m})\, \varphi_l \varphi_m L(l, m) = \varphi_{l+m} K(l, m) \tag{1.2}$$

где φ_l — произвольная положительная функция натурального аргумента, $\varphi_1 = 1$.

2. В последнее время развивается более общий подход к описанию коагулирующих систем [6,7], основанный на тех же физических предпосылках, что и теория Смолуховского. Рассматривается однородное пространство объема V, заполненное частицами. Каждое состояние этой системы характеризуется спектром масс

$$Q = \{n_1 \ldots,\ n_l \ldots,\ n_m \ldots,\ n_g \ldots,\ n_M\}$$

где n_g — числа частиц из g мономеров (числа заполнения). Каждому состоянию Q приписывается зависящая от времени вероятность $W(Q, t)$. Считается, что под действием некоторых случайных сил частицы хаотически двигаются, распадаются или, сталкиваясь, сливаются. В результате единичного акта соударения происходит слияние двух частиц, вследствие чего система из состояния переходит в состояние

$$Q^+ = \{n_1 \ldots,\ n_l - 1 \ldots,\ n_m - 1 \ldots,\ n_g + 1 \ldots,\ n_M\},\quad g = l + m$$

массовый спектр которого отличается всего тремя числами заполнения (или двумя, если сталкиваются одинаковые частицы). Распад соответствует обратному процессу $Q^+ \to Q$. Если заданы скорости переходов $Q \to Q^+$, $Q^- \to Q$ $((Q^-)^+ \equiv Q)$, то уравнение для $W(Q, t)$ получим в виде

$$\frac{dW(Q,t)}{dt} = \sum_{Q^-} A(Q, Q^-)\, W(Q^-, t) - W(Q, t) \sum_{Q^+} A(Q^+, Q) + \sum_{Q^+} B(Q, Q^+)\, W(Q^+, t) - W(Q, t) \sum_{Q^-} B(Q^-, Q) \tag{2.1}$$

Выражения для скоростей переходов $A(Q, Q^-)$ и $B(Q^+, Q)$ через $K(l, m)$ и $L(l, m)$ получаются из комбинаторных соображений:

$$A(Q, Q^-) = K(l, m)\, n_l(Q^-)\, [n_m(Q^-) - \delta_{l,m}] \,/\, V(1 + \delta_{l,m})$$
$$B(Q, Q^+) = n_{l+m}(Q^+)\, L(l, m)$$

Обозначение $n_g(Q)$ использовано для указания принадлежности числа заполнения n_g состоянию Q. В процессах коагуляции и распада сохраняется полная масса всех частиц

$$\sum_g g n_g = M$$

Теория Смолуховского получается из указанного подхода в результате перехода к термодинамическому пределу (объем и средние числа заполнения стремятся к бесконечности, а их отношение остается конечным). Этот переход подробно прослежен в работе [7].

В системах с распадами возможно установление стационарного режима, который определяется из уравнения (2.1) при $dW / dt = 0$. Исследуем стационарные решения в случае, когда скорость распада и коэффициенты коагуляции связаны соотношением (1.2). Эта связь имеет место, например, если после столкновения капель образуется возбужденная капля с избыточной энергией, приводящей к дальнейшему ее распаду. Поскольку при распаде могут образовываться не только частицы с массами l и m, этот случай не сводится к медленной коагуляции.

Если соотношение (1.2) выполняется, то с учетом (2.1) получим стационарное решение в виде

$$W(Q) = \frac{M!\, W_1(M)}{V^M} \prod_{l=1}^{M} \frac{V^{n_l}}{n_l!\, \varphi_l^{n_l}} \tag{2.2}$$

где $W_1(M)$ — вероятность конфигурации $\{M, 0, 0 \ldots, 0\}$.

Результат (2.2) есть следствие равенства

$$A(Q, Q^-)W(Q^-) = B(Q^-, Q)W(Q) \tag{2.3}$$

Действительно,

$$W(Q^-)\, A(QQ^-) = \frac{K(l, m)\, n_l(Q^-)\, [n_m(Q^-) - \delta_{l,m}]\, M!\, W_1(M)}{(1 + \delta_{l,m})\, V^{M+1}} \times$$

$$\times \prod_{\nu=1}^{M} \frac{V^{n_\nu(Q^-)}}{n_\nu(Q^-)!\, \varphi_\nu^{n_\nu}(Q^-)}$$

Учитывая, что $n_l(Q^-) = n_l(Q) + 1$, $n_m(Q^-) = n_m(Q) + 1$, а остальные $n_\nu(Q^-) = n_\nu(Q)$, получим (2.3). Аналогично доказывается, что $B(Q, Q^+)W(Q^+) = A(Q^+, Q)W(Q)$ для любой пары конфигураций Q, Q^+. Таким образом, решение (2.2) обеспечивает не только интегральный баланс вероятностей для произвольной конфигурации Q, но и равенство потоков вероятностей для любой пары конфигураций Q_1, Q_2.

Для полного определения $W(Q)$ остается найти $W_1(M)$. Учитывая равенства

$$\sum_Q W(Q) = 1, \quad \sum_{Q,\nu} \nu n_\nu(Q)\, W(Q) = M$$

получим

$$MP_M = V\left[\sum_{\nu=1}^{M-1} \frac{\nu P_{M-\nu}}{\varphi_\nu} + \frac{M}{\varphi_M}\right], \quad P_l \equiv \frac{V^l}{l!\, W_1(l)} \tag{2.4}$$

Рекуррентное соотношение (2.4) для P_l разрешим, используя производящую функцию

$$f(z) = \sum_l z^l P_l$$

Для $f(z)$ из (2.4) найдем

$$f(z) = \exp\left(V \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{\varphi_n}\right) - 1 \tag{2.5}$$

Исследуем стационарный спектр

$$c_g{}^S = \frac{\bar{n}_g}{V} \equiv \frac{1}{V} \sum_Q W(Q)\, n_g(Q)$$

Аналогично выводу формулы (2.4) найдем

$$c_g^S = P_{M-g} / (\varphi_g P_M) \tag{2.6}$$

Для перехода к бесконечным системам необходимо найти асимптотику P_M при $M \to \infty$. Для P_M из (2.4) имеем

$$P_M = \frac{1}{2\pi i} \oint \frac{dz}{z^{M+1}} \exp\left[V \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{\varphi_n}\right]$$

Здесь интегрирование производится по контуру, окружающему начало координат в комплексной плоскости z и проходимому против часовой стрелки. Оценивая интеграл методом перевала, получим

$$P_M \simeq x_0^{-1} (\psi''(x_0) / 2\pi)^{1/2} \exp \psi(x_0)$$

$$\psi(x) = V \sum_{n=1}^{\infty} \frac{x^n}{\varphi_n} - M \ln x$$

Здесь x_0 — точка, в которой $\psi'(x) = 0$. Из выражения для ψ находим, что точка перевала определяется из уравнения

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{n x_0^n}{\varphi_n} = \rho, \quad \rho \equiv M / V \tag{2.7}$$

Здесь ρ имеет смысл массы частиц в единице объема. Тогда

$$P_M = (2\pi M)^{-1/2} x_0^{-M} \exp\left(V \sum_{n=1}^{\infty} \frac{x_0^n}{\varphi_n}\right) \times$$

$$\times \left[1 + \frac{1}{\rho} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{n(n-1) x_0^n}{\varphi_n}\right]^{1/2}$$

Отсюда получим массовый спектр в бесконечной системе,

$$c_g^S = x_0^g / \varphi_g \tag{2.8}$$

Для иллюстрации рассмотрим некоторые конкретные функции φ_g.

1°. $\varphi_g = g$. Из (2.5) следует $f(z) = (1 - z)^{-V} - 1$, т. е.,

$$P_l = V(V + 1) \ldots (V + l - 1) / l!$$

Величина x_0 находится из соотношения (2.7), принимающего в этом случае вид

$$\sum_{n=1}^{\infty} x_0^n = x_0 / (1 - x_0) = \rho$$

Для стационарного спектра в бесконечной системе имеем

$$c_g^S = g^{-1} [\rho / (\rho + 1)]^g$$

2°. $\varphi_g = b^{g-1}$. В этом случае для $f(z)$ и P_M получим

$$f(z) = \exp\left(\frac{Vbz}{b - z}\right) - 1$$

$$P_M = V^M \sum_{n=0}^{M-1} \binom{M-1}{n} \frac{(Vb)^{-n}}{(M-n)!}$$

Для x_0 из (2.7) найдем

$$b\sum_{n=1}^{\infty} n\left(\frac{x_0}{b}\right)^n = \rho, \quad \frac{x_0}{b} \equiv \gamma = \left(1+\frac{b}{2\rho}\right) - \left(\frac{b^2}{4\rho^2}+\frac{b}{\rho}\right)^{1/2}$$

Величина $\gamma < 1$, причем $\gamma \to 0$ при $\rho \to 0$ и $\gamma \to 1$ при $\rho \to \infty$. Стационарный спектр в бесконечной системе имеет вид

$$c_g{}^S = b\gamma^g$$

3. Проанализируем связь стационарных спектров в бесконечной системе со стационарными ($d\,/\,dt = 0$) решениями уравнения Смолуховского (1.1) для систем с распадом. При выполнении связи (1.2) решение (2.8) является точным решением стационарного уравнения (1.1) при любых значениях x_0. Для выбора x_0 необходимо учесть закон сохранения массы в единице объема

$$\sum_g g c_g{}^S = \rho$$

что делает естественным выбор x_0 из соотношения (2.7). Необходимо отметить, что стационарный режим реализуется при любых значениях плотности, если ряд

$$u(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{nx^n}{\varphi_n}$$

имеет отличный от нуля радиус сходимости. В этом случае $u(0) = 0$, причем $u(x)$ растет быстрее, чем x, т. е. уравнение $u(x) = \rho$ имеет единственное положительное решение x_0. Поскольку ряд суммируем в точке x_0 (его сумма равна ρ), то суммируемы и величины $gc_g{}^S$.

В заключение укажем, что задача о коагуляции с распадами в конечных системах эквивалентна задаче о динамике циклической структуры элемента группы подстановок под действием случайных транспозиций (см. [11]).

Поступила 20 VIII 1979

ЛИТЕРАТУРА

1. *Волощук В. М., Седунов Ю. С.* Процессы коагуляции в дисперсных системах. Л., Гидрометеоиздат, 1975.
2. *Левич В. Г.* Физико-химическая гидродинамика, М., Физматгиз, 1959.
3. *Melzak Z. A.* A scalar transport equation. Trans. Amer. Math. Soc., 1957, vol. 85, No. 2, p. 547—560.
4. *Nelson L. D.* A numerical study on the initiation of warm rain. J. Atmos. Sci., 1971, vol. 28, No. 5, p. 752—761.
5. *Лушников А. А., Пискунов В. Н.* Формирование стационарных распределений в коагулирующих системах с распадающимися частицами. Коллоид. ж., 1977, т. 39, № 5.
6. *Marcus A. H.* Stochastic coalescence. Technometrics, 1968, vol. 10, No. 1, p. 133—143.
7. *Лушников А. А.* Некоторые новые аспекты теории коагуляции. Изв. АН СССР. Физика атмосферы и океана, 1978, т. 14, № 10.
8. *Домиловский Е. Р., Лушников А. А., Пискунов В. Н.* Моделирование процессов коагуляции методом Монте-Карло. Докл. АН СССР, 1978, т. 240, № 1.
9. *Домиловский Е. Р., Лушников А. А., Пискунов В. Н.* Моделирование процессов коагуляции методом Монте-Карло. Изв. АН СССР. Физика атмосферы и океана, 1979, т. 15, № 2.
10. *Лушников А. А.* Некоторые точно решаемые модели стохастической теории коагуляции. Докл. АН СССР, 1977, т. 237, № 5.
11. *Сачков В. Н.* Вероятностные методы в комбинаторном анализе. М., «Наука», 1978.