Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

В. Г. Дубровский, Об одном точном решении управляющих уравнений модели обратимого роста, *ТМФ*, 1996, том 108, номер 2, 327–336

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf1194>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением

<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 54.89.56.158

26 апреля 2023 г., 06:52:24

В.Г. Дубровский

ОБ ОДНОМ ТОЧНОМ РЕШЕНИИ УПРАВЛЯЮЩИХ УРАВНЕНИЙ МОДЕЛИ ОБРАТИМОГО РОСТА

Проведено исследование системы управляющих уравнений мономерной квазихимической модели обратимого роста в гетерогенной материально открытой среде. Получено точное решение управляющих уравнений в случае линейных по числу частиц констант скоростей реакций роста и распада. Показано, что рассматриваемая модель обладает свойством канонической инвариантности относительно распределения Пойа с изменяющимся во времени средним размером комплексов.

ВВЕДЕНИЕ

В настоящей работе рассматривается система управляющих уравнений, описывающая гетерогенную среду с компонентами сорта A и B , которые реагируют друг с другом по схеме квазихимической мономерной модели обратимого роста $A_1 + B \rightleftharpoons A_1B$; $A_1B + A_1 \rightleftharpoons A_2B$; $\dots$; $A_iB + A_1 \rightleftharpoons A_{i+1}B \dots$. Данная модель широко применяется в теориях конденсации в газовой фазе [1, 2], начального этапа нуклеации тонких пленок на локальных адсорбционных центрах [3], релаксации колебательно-неравновесного газа [4–7], гетерогенного кластерообразования в гиперзвуковых струях [8], а также для ряда задач биологии и медицины [3]. В отличие от моделей необратимого роста, основанных на различных вариантах уравнения Смолуховского для гомогенной среды с реакциями типа $A_i + A_j \rightarrow A_{i+j}$ [9], рассматриваемая модель предполагает установление равновесного состояния с конечным средним размером при $t \rightarrow \infty$. Ограничиваясь учетом реакций комплексов A_iB только с мономерами, мы считаем концентрацию ядер B достаточно малой, чтобы можно было пренебречь межкластерными процессами $A_iB + A_jB \rightleftharpoons A_{i+j}B$ [10]. В такой модели выполняется условие нормировки, или сохранение нулевого момента функции распределения по размерам, а первый момент равен среднему размеру. Это отличает рассматриваемую ситуацию от случая гомогенной среды, где полное число комплексов не сохраняется, а средний размер дается вторым моментом распределения [9].

Хорошо разработаны различные приближенные методы решения систем управляющих уравнений со сложной зависимостью констант скоростей от размера, такие как континуальное приближение [1, 11], методы теории возмущений [4, 12], релаксационные представления [2, 7]. Известно небольшое число точно решаемых случаев в различных моделях реакций, которые обычно связаны с выбором упрощенных констант скоростей. Так, точные решения уравнения Смолуховского для произвольных начальных распределений известны при коагуляционных ядрах $k_{ij} = \text{const}$; $i + j$ [13]; ij [14]. Обзор час-

точно решаемых случаев (например, при монодисперсном начальном условии) можно найти в [9]. Точное решение мономерной модели при постоянных константах скоростей (динамика одномерной модели Изинга с корреляциями между соседними спинами) получено в [15]. Для случая релаксации газа гармонических осцилляторов в приближении одноквантовых переходов точные решения управляющих уравнений даны в [5, 6].

Данная работа посвящена построению точного решения управляющих уравнений для системы $A_iB + A_1 \rightleftharpoons A_{i+1}B$ в случае линейных по размеру i констант скоростей. Исследование проводится для материально открытой системы. Анализируются свойства полученного решения, в частности каноническая инвариантность, а также различные частные случаи. Вопросы интерпретации полученных результатов в работе не рассматриваются. Это будет предметом отдельного сообщения. Оказывается, что линейная по числу частиц модель констант скоростей находит применение в биологии и вирусологии (процесс размножения, динамика популяций, распространение вирусных заболеваний).

1. СИСТЕМА УПРАВЛЯЮЩИХ УРАВНЕНИЙ

Полагая $A_0B \equiv B$, квазихимическую схему мономерного обратимого роста можно представить в виде

Частицы A_1 будем называть мономерами, частицы B — ядрами, а частицы A_iB , состоящей из i мономеров и одного ядра, будем говорить как о комплексе размера i . Прямую и обратные реакции (1) будем трактовать как реакции роста и дробления (распада) комплекса, соответствующие константы скоростей обозначим k_i^+ и k_{i+1}^- . Их предполагаем зависящими только от размера i . Способность среды к материальному контакту с окружением будем характеризовать положительным и отрицательным источниками накачки мономеров интенсивности $P(t)$ и $Q(t)$, соответственно.

Исходя из соображений баланса для нормированной функции распределения комплексов по размерам $f_i(t)$, $i = 0, 1, 2, \dots$ (при $i = 0$ $f_0(t)$ есть доля свободных ядер B) и концентрации мономеров $f_A(t)$ можно записать систему управляющих уравнений [2]

$$d_t f_A(t) = - \sum_{i=1}^{\infty} J_i(t) + P(t) - Q(t) f_A(t), \quad (2)$$

$$d_t f_i(t) = J_i(t)(1 - \delta_{i,0}) - J_{i+1}(t), \quad i = 0, 1, 2, \dots, \quad (3)$$

$$J_i(t) \equiv k_{i-1}^+ f_A(t) f_{i-1}(t) - k_i^- f_i(t), \quad i = 1, 2, 3, \dots \quad (4)$$

Величина $J_i(t)$ имеет смысл тока по оси размеров. Символ Кронекера $\delta_{i,0}$ в (3) означает запрет на распад ядра B . Уравнение (2) отражает факт изменения концентрации мономеров в результате каждой из реакций (1) и за счет источников.

Введем моменты функции распределения порядка g согласно определению

$$M_g(t) \equiv \sum_{i=0}^{\infty} i^g f_i(t), \quad g = 0, 1, 2, \dots \quad (5)$$

Очевидно, первый момент $M_1(t)$ есть средний размер комплексов:

$$M_1(t) = \langle i \rangle_t. \quad (6)$$

Функция

$$D(t) = \langle (i - \langle i \rangle_t)^2 \rangle_t = M_2(t) - M_1^2(t) \quad (7)$$

есть дисперсия распределения в момент времени t . Для нулевого и первого моментов функции распределения из (2), (3) следуют условия нормировки (закон сохранения полного числа ядер) и баланса полного числа мономеров

$$M_0(t) = 1, \quad (8)$$

$$d_t M_1(t) + d_t f_A(t) = P(t) - Q(t) f_A(t). \quad (9)$$

В латерально изолированной системе ($P = Q = 0$) вместо (9) справедлив закон сохранения полного числа мономеров

$$M_1(t) + f_A(t) = \Gamma, \quad (10)$$

где Γ есть отношение полного числа частиц сорта A к полному числу ядер B .

Система (2)–(4) представляет собой бесконечную цепочку связанных уравнений, наличие интегральных условий баланса делает ее к тому же нелинейной. Аналитические исследования (2)–(4) при сложной зависимости констант скоростей от размера проводятся поэтому в рамках различных приближений. Наиболее распространенным является континуальное приближение, особенно в применении к кинетике гетерогенной нуклеации в газах [1, 2] и на поверхности [3]. При этом в свободномолекулярном режиме роста для больших кластеров $k_i^+ = \text{const } i^{1-1/d}$, где d – размерность пространства, а k_i^- можно восстановить из k_i^+ на основе принципа детального баланса с макроскопической аппроксимацией для свободной энергии образования зародыша. Цепочка уравнений (3) при $i \gg 1$ заменяется одним уравнением в частных производных фоккер-планковского типа, а условия баланса (8), (9) или (10) преобразуются в интегральные уравнения, содержащие долю свободных ядер и пересыщение пара мономеров [1]. Ясно, что континуальное приближение неприменимо в области малых размеров, например для исследования кластерообразования в недосыщенных или слабо метастабильных средах [7]. Кроме того, переход к континуальному приближению неоправдан и при очень высоких степенях метастабильности среды [11, 16].

Другим часто применяемым методом решения (2)–(4) служит метод приближенной диагонализации трехдиагональной матрицы переходов. Один из вариантов диагонализующего преобразования был предложен в [7] для случая колебательной релаксации слабоангармонических осцилляторов, а затем применен в [2] для описания гетерогенной конденсации в ламинарном потоке парогазовой смеси. Однако данный подход применим в основном при исследовании состояний, близких к стационарным, и не описывает движение ростового фронта по оси размеров.

Исходя из сказанного ясно, что представляет интерес отыскание моделей, в которых система управляющих уравнений решается точно. Результаты, полученные ниже, обобщают известные решения [5, 6] на случай произвольного коэффициента при линейном члене в константе скорости роста, зависимости концентрации мономеров от времени и наличия источников.

2. РАВНОВЕСНОЕ СОСТОЯНИЕ

Решение (2)–(4) при $t \rightarrow \infty$ находится из принципа детального баланса $J_i(\infty) = 0$, $i = 1, 2, 3, \dots$. Из (4) с учетом (8) для равновесных концентраций $f_i(\infty)$ следует известное выражение [2]

$$f_i(\infty) = H^{-1}(x) \zeta_i x^i, \quad i = 1, 2, 3, \dots, \quad (11)$$

$$\zeta_i \equiv \prod_{j=0}^{i-1} k_j^+ / k_{j+1}^-, \quad (12)$$

$$H(x) \equiv \sum_{i=0}^{\infty} \zeta_i x^i \quad (\zeta_0 \equiv 1). \quad (13)$$

Здесь $x \equiv f_A(\infty)$ есть равновесная концентрация мономеров. В случае с источниками накачки из (9), (2) заключаем, что равновесие может достигаться только при

$$f_A(\infty) = P(\infty)/Q(\infty). \quad (14)$$

В материально изолированной системе для нахождения $f_A(\infty)$ используется закон сохранения (10), который при $t \rightarrow \infty$ можно записать в виде

$$x \left(1 + \frac{d \ln H(x)}{dx} \right) = \Gamma. \quad (15)$$

Из (12) следует, что равновесное распределение зависит лишь от отношения констант скоростей реакций роста и дробления друг к другу $k_i = k_i^+ / k_{i+1}^-$ (термодинамическая константа равновесия реакций (1)). Поэтому равновесное распределение не меняется при переходе от $k_i^\pm$ к более общей модели

$$\tilde{k}_i^+ = k_i^+ \Psi(i), \quad \tilde{k}_i^- = k_i^- \Psi(i-1), \quad (16)$$

где $\Psi(i)$ – произвольная функция размера.

В дальнейшем мы будем интересоваться линейной по размеру комплексов моделью констант скоростей

$$k_i^+ = k^+(1 + \alpha i), \quad k_i^- = k^- i, \quad i = 0, 1, 2, \dots \quad (\alpha > 0). \quad (17)$$

Коэффициенты ζ_i при этом имеют вид

$$\zeta_i = (k^+ / k^-)^i \prod_{j=0}^{i-1} (1 + j\alpha) / j!. \quad (18)$$

Функцию $H(x)$ с коэффициентами (18) легко вычислить, используя равенство

$$\sum_{i=0}^{\infty} \frac{\prod_{j=0}^{i-1} (1 + j\alpha)}{i!} Y^i = (1 - \alpha Y)^{-1/\alpha}, \quad \alpha Y < 1, \quad (19)$$

которое проверяется непосредственно разложением правой части в ряд по Y :

$$H(x) = (1 - \alpha k^+ x/k^-)^{-1/\alpha}, \quad \alpha k^+ x/k^- < 1. \quad (20)$$

Подставляя (18), (20) в (11), заключаем, что равновесное состояние в системе с линейными по i константами скоростей, равно как и для более общего случая (16), описывается распределением Пойа

$$f_i(\infty) = [1 + \alpha M_1(\infty)]^{-1/\alpha} \frac{\prod_{j=0}^{i-1} (1 + j\alpha)}{i!} \left[\frac{M_1(\infty)}{1 + \alpha M_1(\infty)} \right]^i. \quad (21)$$

Средний размер комплексов при $t \rightarrow \infty$ связан с равновесной концентрацией мономеров соотношением

$$M_1(\infty) = \frac{k^+ f_A(\infty)}{k^- - \alpha k^+ f_A(\infty)}. \quad (22)$$

В материально открытой системе $f_A(\infty)$ определяется выражением (14), поэтому относительно источников необходимо дополнительно предположить

$$P(\infty)/Q(\infty) < \frac{k^-}{\alpha k^+}. \quad (23)$$

Когда неравенство (23) обращается в равенство, $M_1(\infty) = \infty$. Это означает, что рост становится необратимым [9]. Расходимость числа частиц вызвана либо сильной накачкой, либо доминирующими при больших i процессами роста ($\alpha P(\infty)/Q(\infty) \gg 1$ при сравнимых k^- и k^+). В обоих случаях система управляющих уравнений (2)–(4) для достаточно больших $t > t_c$ становится несправедливой, поскольку при увеличении плотности среды необходим учет межкластерных взаимодействий.

Для материально изолированной системы из (15), (20) нетрудно получить

$$f_A(\infty) = \frac{1}{2} \left(\Gamma + \frac{k^+ + k^-}{\alpha k^+} \right) - \frac{1}{2} \left[\left(\Gamma + \frac{k^+ + k^-}{\alpha k^+} \right)^2 - 4 \frac{k^- \Gamma}{\alpha k^+} \right]^{1/2}. \quad (24)$$

В данном случае равновесный средний размер положителен и конечен для любых значений k^+ , α и $k^- > 0$.

3. ЭВОЛЮЦИЯ ИЗ ПРОИЗВОЛЬНОГО НАЧАЛЬНОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ

Обратимся к изучению эволюции системы в равновесное состояние из заданного начального распределения

$$f_A(t=0) = f_A(0), \quad f_i(t=0) = f_i(0). \quad (25)$$

Решение управляющих уравнений проще всего получить, воспользовавшись методом производящей функции [6]

$$f(z, t) = \sum_{i=0}^{\infty} f_i(t) z^i. \quad (26)$$

Из определения $f(z, t)$ следует

$$f(1, t) = M_0(t) = 1, \quad (27)$$

$$\partial_z f(z, t)|_{z=1} = M_1(t). \quad (28)$$

Дифференцируя $f(z, t)$ по t и используя (3), (27), в случае констант скоростей (17) получим замкнутое уравнение порядка для производящей функции с начальным условием в виде степенного ряда

$$\partial_t f(z, t) - (z - 1)[k^- - \alpha k^+ f_A(t)z] \partial_z f(z, t) = (z - 1)k^+ f_A(t) f(z, t), \quad (29)$$

$$f(z, t = 0) = \sum_{i=0}^{\infty} f_i(0) z^i. \quad (30)$$

Дифференцируя (29) по z и полагая затем $z = 1$, приходим к уравнению для среднего размера

$$d_t M_1(t) + (k^- - \alpha k^+ f_A(t)) M_1(t) = k^+ f_A(t). \quad (31)$$

Совместно с условием баланса (9) это дает систему уравнений для определения $M_1(t)$ и $f_A(t)$ в материально открытой системе при заданных источниках $P(t)$, $Q(t)$. Ее можно свести к одному уравнению второго порядка для среднего размера

$$\begin{aligned} (1 + \alpha M_1)^{-1} \ddot{M}_1 - \alpha(1 + \alpha M_1)^{-2} \dot{M}_1^2 + \\ + [k^+ + (1 + \alpha M_1)^{-2} k^- + (1 + \alpha M_1)^{-1} Q] \dot{M}_1 + \\ + (1 + \alpha M_1)^{-1} k^- Q M_1 = k^+ P, \end{aligned} \quad (32)$$

$$M_1(t = 0) = M_1(0);$$

$$\dot{M}_1(t = 0) = -\alpha k^+ M_1^2(0) + [\alpha k^+ \Gamma(0) - k^+ - k^-] M_1(0) + k^+ \Gamma(0), \quad (33)$$

где $\Gamma(0) = M_1(0) + f_A(0)$ есть отношение полных концентраций частиц A и B при $t = 0$.

В материально изолированной системе уравнение (31) замкнуто относительно $M_1(t)$, его решение будет приведено ниже. Если считать $f_A(t)$ известной функцией, формальное решение (31) дает связь между $M_1(t)$ и $f_A(t)$, которую можно представить в виде

$$M_1(t) = G(t) + M_1(0) \exp(-F(t)), \quad (34)$$

$$F(t) = k^- t - \alpha k^+ \int_0^t dt' f_A(t'), \quad (35)$$

$$G(t) = \exp(-F(t)) \int_0^t dt' f_A(t') \exp(F(t')). \quad (36)$$

Очевидно, $G(t)$ есть средний размер в момент времени t при условии $M_1(0) = 0$. Из (34), (35) следует, что равновесное состояние с конечным средним размером достигается независимо от начальных условий при $\lim_{t \rightarrow \infty} F(t) = \infty$, или $k^- - \alpha k^+ f_A(\infty) > 0$. Как мы видели, это условие всегда выполнено для изолированных систем, а также для открытых систем при $P(\infty)$ и $Q(\infty)$, удовлетворяющих (23). Концентрация мономеров восстанавливается из решения (32), (33) с помощью (31):

$$f_A(t) = (d_t M_1(t) + k^- M_1(t)) / k^+ (1 + \alpha M_1(t)), \quad (37)$$

что при $t \rightarrow \infty$ совпадает с (22).

При вычислении первых интегралов (29) возникает уравнение Риккати специального вида, имеющее частное решение $z = 1$. Это обстоятельство позволяет получить решение (29) с начальным условием (30) в явном виде

$$f(z, t) = [1 + \alpha G(t)(1 - z)]^{-1/\alpha} \Sigma, \quad (38)$$

где

$$\Sigma = \sum_{i=0}^{\infty} f_i(0) \left[\frac{1 + (\alpha G(t) - \exp(-F(t)))(1 - z)}{1 + \alpha G(t)(1 - z)} \right]^i.$$

Легко убедиться, что (38) обладает свойствами (27), (28). Поскольку $G(t) = M_1(t)$ при $M_1(0) = 0$ и $\exp(-F(t)) = (M_1(t) - G(t))/M_1(0)$ для $M_1(0) > 0$, для окончательного определения производящей функции, а с ней и распределения комплексов по размерам требуется лишь решение уравнения (31) или (33). При $t \rightarrow \infty$ $M_1(\infty) = G(\infty)$, поэтому

$$f(z, \infty) = [1 + \alpha M_1(\infty)(1 - z)]^{-1/\alpha}. \quad (39)$$

Коэффициенты разложения (39) в ряд по z дают равновесное распределение Пуассона (21).

Таким образом, (38) есть точное решение динамической задачи для произвольного начального распределения. Оно содержит бесконечный набор констант $f_i(0)$. На практике обычно интересуются ситуацией с $f_i(0) = \delta_{i,0}$ (монодисперсное начальное условие), которая является частным случаем распределения Пуассона при $M_1(0) = 0$. В следующем пункте будет показано, что для начального условия в виде распределения Пуассона решение представимо в значительно более простой форме.

4. КАНОНИЧЕСКАЯ ИНВАРИАНТНОСТЬ

Рассмотрим частный случай решения (38) при

$$f_i(0) = [1 + \alpha M_1(0)]^{-1/\alpha} \frac{\prod_{j=0}^{i-1} (1 + j\alpha)}{i!} \left[\frac{M_1(0)}{1 + \alpha M_1(0)} \right]^i. \quad (40)$$

Подстановка (40) в (38) с учетом (34) и (19) дает

$$f(z, t) = [1 + \alpha M_1(t)(1 - z)]^{-1/\alpha}, \quad (41)$$

т.е. производящая функция сохраняет первоначальный вид при всех t . Следовательно, сохраняется во времени и начальное распределение Пуассона:

$$f_i(t) = [1 + \alpha M_1(t)]^{-1/\alpha} \frac{\prod_{j=0}^{i-1} (1 + j\alpha)}{i!} \left[\frac{M_1(t)}{1 + \alpha M_1(t)} \right]^i. \quad (42)$$

Зависимость от времени теперь осуществляется только через средний размер, по-прежнему определяемый уравнением (31) при $f_A(t) = \Gamma - M_1(t)$ для замкнутой системы

или (33) для открытой системы. Это свойство позволяет говорить о канонической инвариантности рассматриваемой модели. Так, в [5, 6] было показано, что в случае колебательной релаксации газа гармонических осцилляторов наблюдается сохранение начального больцмановского распределения с изменяющейся колебательной температурой. Аналогично можно сказать, что система управляющих уравнений (3)–(5) с линейными по i константами скоростей обладает свойством канонической инвариантности относительно распределения Пойа с меняющимся средним размером комплексов.

Отметим некоторые особенности распределения (42). При $\alpha = 1$ оно совпадает с геометрическим распределением

$$f_i(t) = M_1^i(t) / (1 + M_1(t))^{i+1}, \quad (43)$$

которому можно придать больцмановский вид, если положить $M_1(t) / (1 + M_1(t)) \equiv \exp(-\epsilon(t))$. В пределе $\alpha \rightarrow 0$, соответствующем одинаковой для всех размеров константе скорости роста k^+ , распределение (42) переходит в распределение Пуассона

$$f_i(t) = \exp(-M_1(t)) M_1^i(t) / i!. \quad (44)$$

Распределение Пойа имеет дисперсию

$$D(t) = M_1(t)(1 + \alpha M_1(t)), \quad (45)$$

т.е. разброс размеров комплексов возрастает с увеличением α . Минимальный разброс соответствует распределению Пуассона.

5. НЕКОТОРЫЕ ЧАСТНЫЕ СЛУЧАИ РЕШЕНИЙ

Для материально изолированной системы из уравнений (31), (10) получаем следующее уравнение на средний размер:

$$d_t M_1(t) = -\alpha k^+ M_1^2(t) + (\alpha k^+ \Gamma - k^+ - k^-) M_1(t) + k^+ \Gamma. \quad (46)$$

Решение (46) имеет вид ($\alpha > 0$)

$$\begin{aligned} M_1(t) &= \frac{a_1 + |a_2| \exp(-\alpha k^+ (a_1 + |a_2|)t)}{1 - C \exp(-\alpha k^+ (a_1 + |a_2|)t)}, \\ a_{1,2} &\equiv \frac{1}{2} \left(\Gamma - \frac{k^+ + k^-}{\alpha k^+} \right) \pm \frac{1}{2} \left[\left(\Gamma - \frac{k^+ + k^-}{\alpha k^+} \right)^2 + \frac{4\Gamma}{\alpha} \right]^{1/2}, \\ C &\equiv (M_1(0) - a_1) / (M_1(0) + |a_2|). \end{aligned} \quad (47)$$

Функция $G(t)$, входящая в решение (38) для произвольных начальных распределений, получается из (47) при $C = -a_1/|a_2|$. При $t \rightarrow \infty$ $M_1(\infty) = a_1$, $f_A(\infty) = \Gamma - a_1$, что согласуется с (24).

Рассмотрим подробнее случай $\alpha \rightarrow 0$. При пуассоновских начальных распределениях решение дается выражением (44). В случае произвольных $f_i(0)$ производящая функция (38) при $\alpha = 0$ принимает более простой вид

$$f(z, t) = \exp[G(t)(z - 1)] \sum_{i=0}^{\infty} f_i(0) [1 + b(t)(z - 1)]^i, \quad (48)$$

$$b(t) = \exp(-k^- t); \quad G(t) = M_1(t) - M_1(0)b(t). \quad (49)$$

Восстанавливая функцию распределения из (48), (49), получаем

$$f_i(t) = \exp(-G(t)) \frac{[G(t) + b(t)\partial z]^i}{i!} f(z, 0)|_{z=1-b(t)}. \quad (50)$$

Следовательно, концентрации $f_i(t)$ получаются применением пуассоновского дифференциального оператора к производящей функции при $t = 0$ с последующей заменой z на $1 - b(t)$.

В отсутствие распада комплексов ($k^- = 0$) выражение (50) сводится к известному результату [3]

$$f_i(t) = \sum_{j \geq 0} T_{ij}(t) f_j(0), \quad (51)$$

где пропагатор $T_{ij}(t)$ имеет вид

$$T_{ij}(t) = \exp(-G(t)) G^{i-j}(t) / (i-j)!, \quad 0 \leq j \leq i, \\ T_{ij}(t) = 0, \quad j > i, \quad (52)$$

$$G(t) = M_1(t) - M_1(0) = k^+ \int_0^t dt' f_A(t'). \quad (53)$$

Разумеется, в случае $k^- = 0$ $M_1(t) \rightarrow \infty$ при $t \rightarrow \infty$.

Уравнение (32) для среднего размера при $\alpha = 0$ становится линейным и может быть исследовано для широкого класса источников. В простейшем случае $P(t) = P = \text{const}$ и $Q(t) = Q = \text{const}$ решение (32), (37) есть

$$f_A(t) = P/Q + C_1 \exp(-\lambda_1 t) + C_2 \exp(-\lambda_2 t), \quad (54)$$

$$M_1(t) = k^+ P/k^- Q + (\lambda_2/k^- - 1)C_1 \exp(-\lambda_1 t) + (\lambda_1/k^- - 1)C_2 \exp(-\lambda_2 t), \quad (55)$$

$$\lambda_{1,2} \equiv \frac{1}{2}(k^+ + k^- + Q) \mp \frac{1}{2}[(k^+ + k^- + Q)^2 - 4k^- Q]^{1/2},$$

$$C_1 \equiv f_A(0) - \frac{\lambda_2(f_A(0) + P/Q) - P - k^- \Gamma(0)}{\lambda_2 - \lambda_1},$$

$$C_2 \equiv \frac{\lambda_2 f_A(0) + \lambda_1 P/Q - P - k^- \Gamma(0)}{\lambda_2 - \lambda_1}.$$

Очевидно, $\lambda_2 > \lambda_1 > 0$, поэтому $f_A(\infty) = P/Q$ и $M_1(\infty) = k^+ P/k^- Q$, что совпадает с (14), (22) при $\alpha = 0$. Заметим, что в данном случае неравенство (23) заведомо выполнено, поэтому равновесное состояние с $M_1(\infty) = k^+ P(\infty)/k^- Q(\infty)$ достигается при любых источниках $P(t)$, $Q(t)$.

Для материально изолированной системы при $\alpha = 0$ вместо (47) имеем выражения

$$\begin{aligned} M_1(t) &= C^+ \Gamma - (f_A(0) - C^- \Gamma) \exp[-(k^+ + k^-)t], \\ f_A(t) &= C^- \Gamma - (f_A(0) - C^- \Gamma) \exp[-(k^+ + k^-)t], \end{aligned} \quad (56)$$

где $C^\pm \equiv k^\pm / (k^+ + k^-)$ – приведенные значения констант скоростей реакции $A_1 + B \rightleftharpoons A_1 B$.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, для линейных по числу частиц констант скоростей роста и распада удается получить точное решение системы управляющих уравнений. Это решение можно обобщить на случай переменного числа ядер, а также наличия источников комплексов различного размера. Возможно, точное решение может быть построено и для квадратичной зависимости $k_i^+ = k^+ (1 + \alpha i + \beta i^2)$, $k_i^- = k^- (i + \gamma i^2)$. В этом случае для производящей функции будем иметь уравнение в частных производных второго порядка. Представляет интерес исследование нелинейного уравнения для среднего размера при $\alpha > 0$, режимов с мощной накачкой, обобщение модели на случай учета межкластерных парных реакций. Указанные вопросы, а также возможности применения полученных результатов к некоторым конкретным задачам будут рассмотрены в дальнейшем.

Список литературы

- [1] Ф. М. Куни, Т. Ю. Новожилова, И. А. Терентьев // ТМФ. 1986. Т. 60. №2. С. 276.
- [2] А. В. Богданов, Ю. Е. Горбачев, Г. В. Дубровский, А. Л. Иткин, Е. Г. Колесниченко, В. М. Стрельченя // Химическая физика. 1989. Т. 8. №5. С. 677.
- [3] J. B. Adams, W. N. G. Hitchon // J. Comput. Phys. 1988. V. 76. №1. P. 159.
- [4] Б. Ф. Гордиец, А. И. Осипов, Л. А. Шелепин. Кинетические процессы в газах и молекулярных лазерах. М.: Наука, 1980.
- [5] E. W. Montroll, K. E. Shuler // J. Chem. Phys. 1957. V. 26. №5. P. 454.
- [6] C. C. Rankin, J. C. Light // J. Chem. Phys. 1967. V. 46. №4. P. 1305.
- [7] А. П. Васильев, Г. В. Дубровский, В. М. Стрельченя // ПМТФ. 1984. №5. С. 22.
- [8] J. Q. Searcy // J. Chem. Phys. 1974. V. 61. №12. P. 5282.
- [9] М. Эрнст // Фракталы в физике / Ред. Л.Пьетровери и Э.Тозатти. М.: Мир, 1988.
- [10] А. А. Лушников, А. Г. Сутугин // Усп. химии. 1976. Т. 45. №7. С. 386.
- [11] В. Г. Дубровский // Коллоидн. журн. 1990. Т. 52. №2. С. 243.
- [12] B. Caroli, C. Caroli, B. Roulet // J. Stat. Phys. 1979. V. 21. P. 415.
- [13] А. М. Головин // Изв. АН СССР, сер. Геофизика. 1963. Вып. 5. С. 783.
- [14] С. И. Кучанов // ДАН СССР. 1976. Т. 229. С. 135.
- [15] R. J. Glauber // J. Math. Phys. 1963. V. 4. №3. P. 294.
- [16] Ф. М. Куни, А. П. Гринин // Вестн. ЛГУ. 1982. №22. С. 10.

Институт аналитического приборостроения РАН
Санкт-Петербург

Поступила в редакцию
3.XI.1995 г.

V. G. Dubrovsky

ON THE EXACT SOLUTION OF MASTER EQUATIONS OF REVERSIBLE GROWTH MODEL

A set of master equations of reversible quasichemical growth model in a heterogeneous materialy open system is studied. For the case of size-linear rate constants, the exact analytical solution of master equations is obtained. It is shown that the model is canonically invariant with respect to the Polya size distribution with a variable mean size of clusters.