ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • Электронная библиотека

Препринты ИПМ • Препринт № 36 за 2019 г.

ISSN 2071-2898 (Print)
ISSN 2071-2901 (Online)

Батищева Я.Г.

Кинетические уравнения и подходы к их анализу в новой модели процессов агрегации-дробления

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Батищева Я.Г. Кинетические уравнения и подходы к их анализу в новой модели процессов агрегации-дробления // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2019. № 36. 19 с. doi:**10.20948/prepr-2019-36**
URL: **http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2019-36**

О р д е н а   Л е н и н а
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
имени М.В.Келдыша
Р о с с и й с к о й   а к а д е м и и   н а у к

Я. Г. Батищева

Кинетические уравнения и подходы к их анализу в новой модели процессов агрегации-дробления

Москва — 2019

Я. Г. Батищева
Кинетические уравнения и подходы к их анализу в новой модели процессов агрегации-дробления

В работе предлагается новая модель процесса агрегации-дробления. Показано, что кинетические уравнения, изначально имеющие квадратичную нелинейность, могут быть сведены к линейным. Проведен анализ конечномерного и бесконечномерного случаев, и рассмотрены важные примеры.

Ключевые слова: процесс агрегации-дробления, кинетические уравнения, бесконечномерные системы ОДУ, стационарное решение.

J. G. Batisheva
The kinetic equations and some approaches to their analysis for the new model of clusterization-destruction processes.

The new model of clusterization-destruction processes is proposed. We have shown that nonlinear equation can be converted to linear. The analysis of finite- and infinite cases is fulfilled, also some particular examples is analysed.

***Key words*:** clusterization-destruction processes, kinetic equations, infinite-dimensional ODE, steady state solution.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ, проект № 17-51-52007а.

Содержание

Введение

В данной работе предлагается новая модель процесса агрегации-дробления. Рассмотрим систему, в которой агрегат, состоящий из $\{n+1\}$ мономеров, образуется в результате присоединения одного мономера к агрегату массы $\{n\}$. Однако ведущую роль в его разрушении играют не внутренние причины: распад, как и агрегация, инициируется столкновением с мономером, который в этом случае не только не присоединяется, но и «выбивает» еще один мономер, так что кроме процесса

$\{n\}+\{1\}\rightarrow\{n+1\}$,

в системе протекает процесс

$\{n+1\}+\{1\}\rightarrow\{n\}+2\{1\}$.

Отличие от классической модели Беккера-Деринга [1,2,3], в которой процесс дробления $\{n+1\}\rightarrow\{n\}+\{1\}$ является простым обращением процесса агрегации $\{n\}+\{1\}\rightarrow\{n+1\}$: в нашем случае процесс дробления также бинарен и зависит от количества мономеров в системе, в то время как в модели Беккера-Деринга этот процесс имеет первый порядок и линейно зависит только от количества самих агрегатов.

Рассмотрим простую физическую модель, которая является эвристическим источником для построения нашей математической модели. Хотя следует оговориться, что множество возможных приложений ею априори ограничить нельзя.

Итак, предположим, агрегат массы $\{n\}$ подвергается столкновению с мономером $\{1\}$, причем мономеры образуют газовую среду и обладают энергией, описываемой распределением Максвелла [4, 5]:

$$f(E)=\frac{2\pi}{(\pi kT)^{3/2}}\cdot E^{1/2}e^{-\frac{E}{kT}}.$$

Кроме того, предположим, что взаимодействие мономера с агрегатом описывается энергетическим профилем с глубиной потенциальной ямы E_0, который схематически можно изобразить с помощью графика 1:

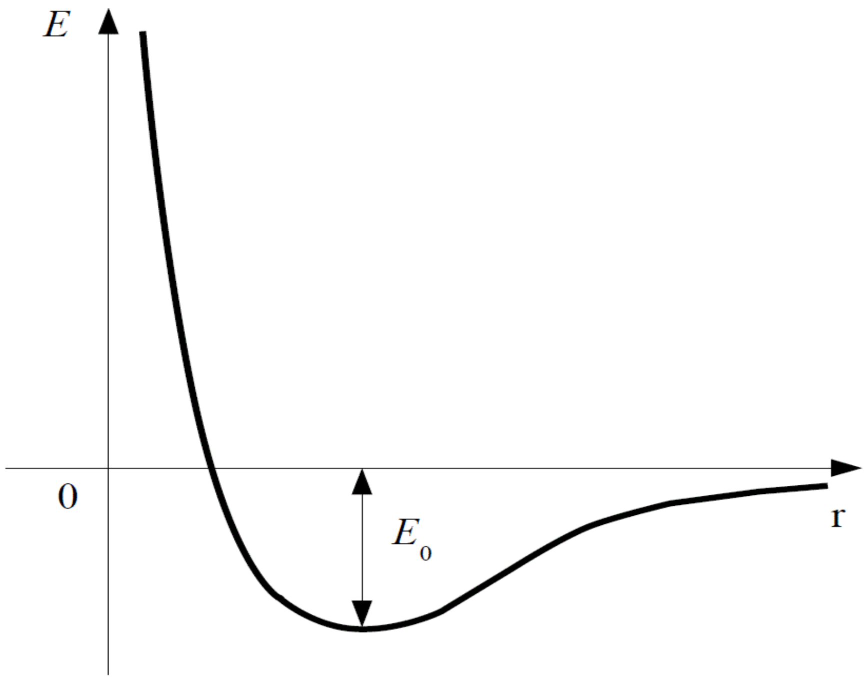

График 1.

где r — условное расстояние между агрегатом и мономером. Тогда в грубом, но достаточном для нас приближении вероятность того, что мономер присоединится, будет пропорциональна доле мономеров, имеющих энергию меньше E_0, мономеры с энергиями в промежутке между E_0 и $2E_0$ будут рассеиваться поверхностью агрегата без структурных изменений, и, наконец, доля мономеров с энергией, превышающей $2E_0$, будет уменьшать массу агрегата, сообщая одному из его мономеров энергию, достаточную, чтобы покинуть агрегат. Пользуясь предположением о максвелловском распределении мономеров по энергиям, мы можем оценить вероятности соответствующих процессов, как показано на графике 2.

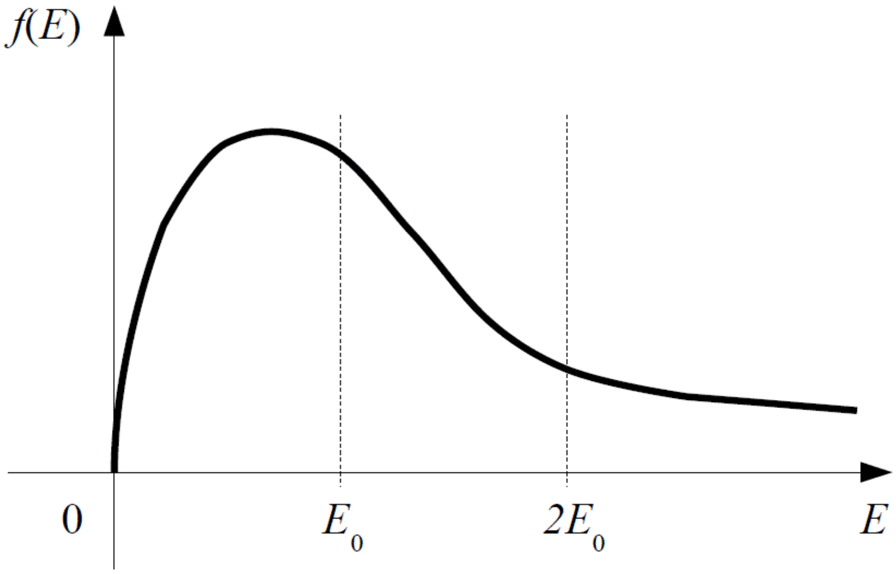

График 2.

Собственно выражения для оценки вероятностей исхода столкновения можно представить следующим образом:

$$\{n\} + \{1\} \to \{n+1\}, \;\; p_+ = \int_0^{E_0} f(E)dE \;\; ,$$

$$\{n\} + \{1\} \to \{n\} + \{1\}, \;\; p = 1 - p_+ - p_- = \int_{E_0}^{2E_0} f(E)dE,$$

$$\{n\} + \{1\} \to \{n-1\} + 2\{1\}, \;\; p_- = \int_{2E_0}^{\infty} f(E)dE.$$

Заметим, что отношение вероятностей p_+ и p_- зависит только от температуры и величины E_0:

$$\frac{p_+}{p_-} = \varphi\left(\frac{E_0}{kT}\right), \quad \varphi(x) = \int_{2x}^{\infty} \sqrt{x'} e^{-x'} dx' \Big/ \int_0^{x} \sqrt{x'} e^{-x'} dx'.$$

Легко убедиться, что в силу неотрицательности подынтегрального выражения функция $\varphi(x)$ монотонно убывает от $+\infty$ до нуля на интервале $x \in (0;\; +\infty)$.

Конечномерный случай

Рассмотрим систему, в которой происходят процессы агрегации и дробления согласно описанному выше механизму, причем величина агрегата ограничена. Обозначим символом $\{N\}$ агрегаты максимальной массой, где N — некоторое фиксированное натуральное число. Более детально процессы в этой системе можно представить следующим образом. Реакции агрегации:

$$2\{1\} \to \{2\} \text{ с константой } \alpha_1,$$

$$\{n\} + \{1\} \to \{n+1\} \text{ с константой } \alpha_n,\ n \in \{2, \dots, N-1\}.$$

Реакции дробления:

$$\{2\} + \{1\} \to 3\{1\} \text{ с константой } \beta_2,$$

$$\{n\} + \{1\} \to \{n-1\} + 2\{1\} \text{ с константой } \beta_n,\ n \in \{3, \dots, N\}.$$

Тогда кинетические уравнения для концентраций можно будет записать в виде:

$$\begin{gathered}
\frac{dc_1}{dt} = -2\alpha_1 {c_1}^2 + \beta_2 c_1 c_2 + \sum_{n=2}^{N-1} (\beta_n - \alpha_n) c_1 c_n + \beta_N c_1 c_N, \\
\frac{dc_n}{dt} = \alpha_{n-1} c_1 c_{n-1} - (\alpha_n + \beta_n) c_1 c_n + \beta_{n+1} c_1 c_{n+1}, \quad n \in \{2, \dots, N-1\}, \\
\frac{dc_N}{dt} = \alpha_{N-1} c_1 c_{N-1} - \beta_N c_1 c_N.
\end{gathered} \tag{1}$$

Здесь c_1 — концентрация мономера, для всех остальных допустимых натуральных n величина c_n — концентрации агрегатов соответствующей массы.

Заметим, что по своему физическому смыслу константы суть неотрицательные величины. Причем наибольший интерес представляет случай, когда ни одна из констант не равна нулю, так как иначе система асимптотически разделяется на подсистемы того же типа, но меньшей размерности. Из неотрицательности констант следует, что интересующая часть фазового пространства — конус, в котором все c_n неотрицательны, — отображается фазовым потоком системы (1) в себя, что является общим свойством уравнений типа химической кинетики (сохранение неотрицательности решения).

Поскольку общее число мономеров — свободных и входящих в агрегаты — не меняется, то разумно предположить, что система должна обладать по крайней мере одним первым интегралом, имеющим смысл закона сохранения массы.

Утверждение 1. Функция

$$I = \sum_{k=1}^{N} k c_k \tag{2}$$

является первым интегралом системы (1). Доказательство этого утверждения состоит в непосредственном вычислении производной.

$$\frac{dI}{dt} = \sum_{k=1}^{N} k \frac{dc_k}{dt}.$$

При подстановке значений производных $\frac{dc_k}{dt}$ в силу системы (1) и упрощении полученного выражения получим, что $\frac{dI}{dt} \equiv 0$.

Утверждение 2. Пусть $c_1(t) > 0$, тогда существует замена переменных, которая позволяет свести систему (1) к линейной. Действительно, поскольку в правых частях системы (1) величина c_1 входит во все слагаемые по крайней мере в первой степени, выполним замену переменной времени t на величину τ так, что $d\tau = c_1(t)dt$. Тогда система (1) преобразуется к виду:

$$\frac{dc_1}{d\tau} = -2\alpha_1 c_1 + \beta_2 c_2 + \sum_{n=2}^{N-1} (\beta_n - \alpha_n) c_n + \beta_N c_N,$$

$$\frac{dc_n}{d\tau} = \alpha_{n-1} c_{n-1} - (\alpha_n + \beta_n) c_n + \beta_{n+1} c_{n+1}, \quad n \in \{2, \dots, N-1\}, \tag{3}$$

$$\frac{dc_N}{d\tau} = \alpha_{N-1} c_{N-1} - \beta_N c_N.$$

Утверждение 3. Предположим, что константы α_k для всех допустимых значений k строго положительны, тогда стационарное решение системы (3), а значит и (1), существует и единственно для каждого фиксированного значения первого интеграла (2).

Для доказательства сначала заметим, что поскольку интеграл (2) имеет линейную структуру, то правые части уравнений системы (3) линейно зависимы. Это значит, что матрица правой части

$$A = \begin{Vmatrix} -2\alpha_1 & 2\beta_2 - \alpha_2 & \beta_3 - \alpha_3 & \beta_4 - \alpha_4 & \cdots & \beta_{N-2} - \alpha_{N-2} & \beta_{N-1} - \alpha_{N-1} & \beta_N \\ \alpha_1 & -\alpha_2 - \beta_2 & \beta_3 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \alpha_2 & -\alpha_3 - \beta_3 & \beta_4 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & -\alpha_{N-2} - \beta_{N-2} & \beta_{N-1} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & \alpha_{N-2} & -\alpha_{N-1} - \beta_{N-1} & \beta_N \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & \alpha_{N-1} & -\beta_N \end{Vmatrix}$$

вырождена и существует нетривиальная линейная комбинация ее столбцов, равная нулю. Коэффициенты этой линейной комбинации будут соответствовать стационарным значениям c_k для всех k. Итак, тем самым показано, что стационарное решение существует. Покажем, что оно является единственным с точностью до постоянного множителя. Действительно, минор порядка (N-1), получаемый исключением первой строки и последнего столбца, имеет значение

$$det \begin{Vmatrix} \alpha_1 & -\alpha_2 - \beta_2 & \beta_3 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & \alpha_2 & -\alpha_3 - \beta_3 & \beta_4 & \cdots & 0 & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & -\alpha_{N-2} - \beta_{N-2} & \beta_{N-1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & \alpha_{N-2} & -\alpha_{N-1} - \beta_{N-1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & \alpha_{N-1} \end{Vmatrix} =$$

$$= \prod_{k=1}^{N-1} \alpha_k \neq 0,$$

отличное от нуля. Отметим, что отсюда следует, что наша система (3), а следовательно и (1), не имеет других линейных первых интегралов, кроме (2).

Построим стационарное решение для фиксированного значения первого интеграла. Пусть $I(c_1, c_2, \ldots, c_N) = M$. Поскольку последнее уравнение системы (3) имеет только 2 слагаемых, сначала стационарное решение будет удобно выразить через c_N, выражая концентрации агрегатов с меньшими номерами по цепочке из равенства нулю правых частей уравнений системы (3) начиная с последней и заканчивая первой. Мы получим:

$$c_{N-1} = c_N \frac{\beta_N}{\alpha_{N-1}}, \quad c_{N-2} = c_N \frac{\beta_{N-1}\beta_N}{\alpha_{N-2}\alpha_{N-1}}, \ \dots\ , \quad c_1 = c_N \frac{\beta_2 \cdot \ldots \cdot \beta_N}{\alpha_1 \cdot \ldots \cdot \alpha_{N-1}},$$

или для всех k от 1 до $(N-1)$:

$$c_k = c_N \prod_{i=k}^{N-1} \frac{\beta_{i+1}}{\alpha_i};$$

подставив это в выражение для первого интеграла $\sum_{k=1}^{N} kc_k = M$, найдем, что стационарное решение имеет следующий явный вид:

$$c_k = M \frac{\prod_{i=k}^{N-1} \frac{\beta_{i+1}}{\alpha_i}}{\sum_{m=1}^{N} m \prod_{j=m}^{N-1} \frac{\beta_{j+1}}{\alpha_j}}. \qquad (4)$$

Утверждение 4. Гипотеза. Стационарное решение (4) в условиях утверждения (2) является асимптотически устойчивым. Для доказательства этого утверждения достаточно показать, что сужение системы (3) на множество, соответствующее уровню первого интеграла (2) $I(c_1, c_2, \dots, c_N) = M$ с некоторым фиксированным значением $M > 0$, имеет невырожденную матрицу коэффициентов в правой части, порождающую отрицательно определенную квадратичную форму на указанном множестве, которое в силу линейности первого интеграла является $(N-1)$-мерным подпространством. Полное доказательство этого утверждения будет представлено в дальнейших публикациях.

Пример 1 системы малой размерности. Предположим $N = 3$, тогда система (3) примет вид:

$$\frac{dc_1}{d\tau} = -2\alpha_1 c_1 + (2\beta_2 - \alpha_2)c_2 + \beta_3 c_3,$$

$$\frac{dc_2}{d\tau} = \alpha_1 c_1 - (\alpha_2 + \beta_2)c_2 + \beta_3 c_3,$$

$$\frac{dc_3}{d\tau} = \alpha_2 c_2 - \beta_3 c_3.$$

Пусть значение первого интеграла (2) есть некоторая константа $M > 0$, тогда

$$c_1 + 2c_2 + 3c_3 = M,$$

и мы можем понизить размерность системы. Исключив первое уравнение и выразив концентрацию мономера в остальных через концентрации агрегатов, получим:

$$\frac{dc_2}{d\tau} = \alpha_1 M - (2\alpha_1 + \alpha_2 + \beta_2)c_2 + (-3\alpha_1 + \beta_3)c_3,$$

$$\frac{dc_3}{d\tau} = \alpha_2 c_2 - \beta_3 c_3.$$

Рассмотрим характеристическое уравнение для матрицы линейной части этой системы уравнений:

$$\gamma^2 + (2\alpha_1 + \alpha_2 + \beta_2 \ + \beta_3)\gamma + 3\alpha_1\alpha_2 = 0.$$

В силу положительности коэффициентов этого квадратного уравнения, его корни всегда будут иметь отрицательную действительную часть, а следовательно, стационарное решение:

$$c_1 = M \cdot \frac{\beta_2\beta_3}{\alpha_1\alpha_2} \cdot \left(\frac{\beta_2\beta_3}{\alpha_1\alpha_2} + \frac{2\beta_3}{\alpha_2} + 3\right)^{-1},$$

$$c_2 = M \cdot \frac{\beta_2}{\alpha_1} \cdot \left(\frac{\beta_2\beta_3}{\alpha_1\alpha_2} + \frac{2\beta_3}{\alpha_2} + 3\right)^{-1},$$

$$c_3 = M \cdot \left(\frac{\beta_2\beta_3}{\alpha_1\alpha_2} + \frac{2\beta_3}{\alpha_2} + 3\right)^{-1}$$

не только единственно, но и асимптотически устойчиво.

Отметим здесь представляющий значительный интерес с точки зрения приложений случай, являющийся модификацией системы (1) и, соответственно, (3). Предположим, мы имеем дело с ситуацией, при которой в системе протекают все те процессы, которые были указаны в начале этой главы. Однако при этом посредством внешних факторов концентрация мономера поддерживается постоянной. Тогда функция концентраций (2) уже не будет являться первым интегралом, а первое уравнение и в системе (1) и в системе (3) следует заменить на равенство

$$c_1 = const,$$

положив концентрацию мономера равной некоторой фиксированной положительной величине. Таким образом, размерность системы понижается на единицу, а правая часть системы (3) превратится в сумму постоянной и линейной части:

$$\frac{dc_n}{d\tau} = \alpha_{n-1}c_{n-1} - (\alpha_n + \beta_n)c_n + \beta_{n+1}c_{n+1}, \quad n \in \{2, \dots, N-1\},$$
$$\frac{dc_N}{d\tau} = \alpha_{N-1}c_{N-1} - \beta_N c_N. \tag{5}$$

С трехдиагональной матрицей коэффициентов:

$$B = \begin{Vmatrix} -\alpha_2-\beta_2 & \beta_3 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \alpha_2 & -\alpha_3-\beta_3 & \beta_4 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \dots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & -\alpha_{N-2}-\beta_{N-2} & \beta_{N-1} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \alpha_{N-2} & -\alpha_{N-1}-\beta_{N-1} & \beta_N \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & \alpha_{N-1} & -\beta_N \end{Vmatrix}$$

Положим, что для любых k константы реакций дробления β_k являются строго положительными. Тогда аналогично с тем, как строилось стационарное решение системы (3), для системы (5) единственным образом для каждого фиксированного $c_1 = const$ находится решение:

$$c_k = c_1 \prod_{i=1}^{k-1} \frac{\alpha_i}{\beta_{i+1}}, \qquad k = 2, \dots, N. \tag{6}$$

Пример 2 системы малой размерности. Предположим N=3, тогда система (5) примет вид:

$$\frac{dc_2}{d\tau} = \alpha_1 c_1 - (\alpha_2 + \beta_2)c_2 + \beta_3 c_3,$$
$$\frac{dc_3}{d\tau} = \alpha_2 c_2 - \beta_3 c_3.$$

Характеристическое уравнение для матрицы линейной части этой системы уравнений

$$\gamma^2 + (\alpha_2 + \beta_2 \ + \beta_3)\gamma + \beta_2\beta_3 = 0$$

в силу положительности констант α_k и β_k имеет только действительные отрицательные корни. Что доказывает, что в рассматриваемом нами примере стационарное решение единственно и асимптотически устойчиво.

Для этого случая возможно рассмотрение еще одной модификации системы, когда помимо всех вышеуказанных процессов и поддержания постоянства мономера в системе есть процесс, выводящий агрегаты достаточно большой массы из системы. Естественно предположить, что это будут реакции первого порядка по концентрациям агрегатов. Возможно также рассмотрение обратной ситуации, когда концентрации агрегатов большой массы поддерживаются постоянными, а мономеры или агрегаты малых масс, напротив, уходят из системы. Возможны также иные модификации модели, связанные с приложениями, но их рассмотрение мы оставим за рамками этой публикации.

В отношении вопроса о единственности и устойчивости стационарного решения системы (1) стоит отметить, что традиционный для уравнений этого класса подход, в котором строится монотонный на решениях функционал по типу H-функции Больцмана (4, 6), не дает нужного результата.

Выскажем здесь еще одно предположение, исследование которого имеет смысл провести в дальнейшем. Как для исходной системы, приведенной к виду (3), так и в случае поддержания постоянства концентрации мономера может оказаться полезным исследование характеристических многочленов линейных компонент правых частей на предмет положительности их коэффициентов, что позволит доказать асимптотическую устойчивость стационарного решения.

Бесконечномерный случай

Рассмотрим систему, в которой происходят процессы агрегации:

$$2\{1\} \to \{2\} \text{ с константой } \alpha_1,$$

$$\{n\} + \{1\} \to \{n+1\} \text{ с константой } \alpha_n \text{ для любых } n > 1,\, n \in \mathbb{N},$$

и дробления:

$$\{2\} + \{1\} \to 3\{1\} \text{ с константой } \beta_2,$$

$$\{n\} + \{1\} \to \{n-1\} + 2\{1\} \text{ с константой } \beta_n \text{ для любых } n > 2,\ n \in \mathbb{N}.$$

Тогда для описания динамики такой системы можно рассмотреть следующие уравнения:

$$\frac{dc_1}{dt} = -2\alpha_1 {c_1}^2 + \beta_2 c_1 c_2 + \sum_{n=2}^{\infty} (\beta_n - \alpha_n) c_1 c_n,$$
$$\frac{dc_n}{dt} = \alpha_{n-1} c_1 c_{n-1} - (\alpha_n + \beta_n) c_1 c_n + \beta_{n+1} c_1 c_{n+1}, \tag{7}$$
$$n > 1, \qquad n \in \mathbb{N}.$$

Будем рассматривать такое множество решений системы (7), что ряд в правой части первого уравнения сходится.

Утверждение 5. В предположении $c_1(t) > 0$ систему (7) можно свести к линейной. Аналогично тому, как сводилась к линейной конечномерная система, мы и здесь при том же условии можем выполнить замену переменной времени $d\tau = c_1(t)dt$, получив бесконечномерную линейную систему:

$$\frac{dc_1}{d\tau} = -2\alpha_1 c_1 + \beta_2 c_2 + \sum_{n=2}^{\infty} (\beta_n - \alpha_n) c_n,$$
$$\frac{dc_n}{d\tau} = \alpha_{n-1} c_{n-1} - (\alpha_n + \beta_n) c_n + \beta_{n+1} c_{n+1}, \qquad n > 1, \qquad n \in \mathbb{N}. \tag{8}$$

Утверждение 6. Предположим, что мы имеем такую последовательность $\{c_n(\tau)\}$, $n \in \mathbb{N}$, решений системы (8), что ряд

$$I(\tau) = \sum_{n=1}^{\infty} n c_n(\tau) \tag{9}$$

сходится для некоторого τ, тогда $I(\tau) = const$ есть постоянная величина.

Для простоты доказательства предположим, что также сходятся ряды $\sum_{n=1}^{\infty} n\alpha_n c_n(\tau)$ и $\sum_{n=1}^{\infty} n\alpha\beta_n c_n(\tau)$. Тогда непосредственным дифференцированием убеждаемся:

$$\frac{dI(\tau)}{d\tau} = \sum_{n=1}^{\infty} n \frac{dc_n(\tau)}{d\tau} =$$

$$= -2\alpha_1 c_1 + \beta_2 c_2 + \sum_{n=1}^{\infty} (\beta_n - \alpha_n) c_n + \sum_{n=2}^{\infty} n(\alpha_{n-1} c_{n-1} - (\alpha_n + \beta_n) c_n + \beta_{n+1} c_{+1}).$$

Преобразовав правую часть с помощью простых равенств

$$\sum_{n=2}^{\infty} n\alpha_{n-1} c_{n-1} = \sum_{n=1}^{\infty} (n+1)\alpha_n c_n = 2\alpha_1 c_1 + \sum_{n=2}^{\infty} (n+1)\alpha_n c_n,$$

$$\sum_{n=2}^{\infty} n\beta_{n+1} c_{n+1} = \sum_{n=3}^{\infty} (n-1)\beta_n c_n = -\beta_2 c_2 + \sum_{n=2}^{\infty} (n-1)\beta_n c_n$$

и сложив коэффициенты при всех c_n, найдем, что $\frac{dI(\tau)}{d\tau} = 0$. Что доказывает утверждение 6.

Утверждение 7. Пусть константы α_n и β_n для всех допустимых n строго положительны, тогда система (8), а следовательно, и (7), имеет стационарное решение. Доказательство этого утверждения выполним в виде непосредственного построения решения, будем искать его в виде (6). Предположив, что концентрация мономеров есть некоторая положительная величина $c_1 > 0$, определим для всех натуральных n больших единицы:

$$c_k = c_1 \prod_{i=1}^{k-1} \frac{\alpha_i}{\beta_{i+1}}, \qquad n > 1, \qquad n \in \mathbb{N}. \tag{10}$$

И воспользуемся тем, что такие значения концентраций делают равными нулю правые части всех уравнений, начиная со второго, чем мы уже пользовались при рассмотрении конечномерного случая с фиксированной концентрацией мономера c_1. Если при этом окажется, что правая часть и первого уравнения равна нулю, то мы получим требуемое решение. Проверим это, подставив значения концентраций (9) в первое уравнение системы (8), получим:

$$\frac{dc_1}{d\tau} = -\alpha_1 c_1 + c_1 \sum_{n=2}^{\infty} (\alpha_n - \beta_n) \prod_{i=1}^{n-1} \frac{\alpha_i}{\beta_{i+1}} \tag{11}$$

Для дальнейшего анализа этого выражения нам понадобится условие сходимости рядов $\sum_{n=2}^{\infty} \alpha_n \prod_{i=1}^{n-1} \frac{\alpha_i}{\beta_{i+1}}$ и $\sum_{n=2}^{\infty} \beta_n \prod_{i=1}^{n-1} \frac{\alpha_i}{\beta_{i+1}}$. Легко убедиться, что достаточным условием сходимости будет легко проверяемое условие: последовательность отношений констант должна быть ограничена некоторым фиксированным числом, меньшим единицы, то есть должны существовать такие K и ε, что для всех $k > K$ верно $\frac{\alpha_k}{\beta_k} < \varepsilon < 1$. Не исключено, что доказательство нашего утверждения можно провести и в более слабых условиях на константы, но это мы оставим за рамками настоящей публикации. Итак, вернемся к рассмотрению выражения (11), преобразуем часть слагаемых под знаком суммы, соответствующих β_n:

$$c_1 \sum_{n=2}^{\infty} \beta_n \prod_{i=1}^{n-1} \frac{\alpha_i}{\beta_{i+1}} = \alpha_1 c_1 + c_1 \sum_{n=3}^{\infty} \beta_n \prod_{i=1}^{n-1} \frac{\alpha_i}{\beta_{i+1}} =$$

$$= \alpha_1 c_1 + c_1 \sum_{n=2}^{\infty} \beta_{n+1} \prod_{i=1}^{n} \frac{\alpha_i}{\beta_{i+1}} = \alpha_1 c_1 + c_1 \sum_{n=2}^{\infty} \alpha_n \prod_{i=1}^{n} \frac{\alpha_i}{\beta_{i+1}}.$$

Подставив в правую часть (10) преобразованную группу слагаемых, найдем, что:

$$\frac{dc_1}{d\tau} \equiv 0.$$

Значит, искомое решение действительно имеет структуру (10).

Рассмотрим ситуацию, при которой масса в системе (8) конечна, то есть ряд (9) сходится и равен некоторой положительной величине M:

$$I(\tau) = M > 0.$$

Тогда мы можем выразить равновесные концентрации через эту величину:

$$c_1 = M \left(1 + \sum_{n=2}^{\infty} n \prod_{i=1}^{n-1} \frac{\alpha_i}{\beta_{i+1}} \right)^{-1},$$

$$c_k = M \left(1 + \sum_{n=2}^{\infty} n \prod_{i=1}^{n-1} \frac{\alpha_i}{\beta_{i+1}} \right)^{-1} \prod_{j=1}^{k-1} \frac{\alpha_j}{\beta_{j+1}}, \qquad k > 1, \qquad k \in \mathbb{N}.$$

Заметим, что, как и в конечномерном случае, в бесконечномерном может быть рассмотрен случай, когда концентрация мономера посредством внешних факторов поддерживается постоянной, тогда наша система примет вид:

$$c_1 = const,$$
$$\frac{dc_n}{d\tau} = \alpha_{n-1}c_{n-1} - (\alpha_n + \beta_n)c_n + \beta_{n+1}c_{n+1}, \qquad n > 1, \qquad n \in \mathbb{N}, \tag{12}$$

при этом стационарное решение будет строиться также аналогично (6), а точнее, будет иметь вид (10).

Следующей исследовательской задачей естественно будет найти условия, при которых стационарное решение единственно и асимптотически устойчиво. Для общего это планируется сделать в дальнейших работах. А здесь мы рассмотрим один любопытный пример, для которого удается доказать асимптотическую устойчивость с помощью функционала, монотонного в силу решения системы.

Наложим на систему два существенных, но физически осмысленных условия. Во-первых, будем считать, что концентрация мономера поддерживается постоянной $c_1 = const$, а во-вторых, константы α_n, β_n отличны от нуля и таковы, что стационарное решение существует, и для всех допустимых $n \in \mathbb{N}$ верно равенство

$$\beta_n = \sigma\alpha_n,$$

где $\sigma > 0$ — некоторое фиксированное число. Тогда матрица линейного оператора в правой части системы (12) может быть представлена в виде произведения:

$$B = \begin{Vmatrix} -\alpha_2-\beta_2 & \beta_3 & 0 & \dots \\ \alpha_2 & -\alpha_3-\beta_3 & \beta_4 & \dots \\ 0 & \alpha_3 & -\alpha_4-\beta_4 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{Vmatrix} =$$

$$= \begin{Vmatrix} -1-\sigma & \sigma & 0 & \dots \\ 1 & -1-\sigma & \sigma & \dots \\ 0 & 1 & -1-\sigma & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{Vmatrix} \times \begin{Vmatrix} \alpha_2 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \alpha_3 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \alpha_4 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{Vmatrix} = \qquad (13)$$

$$= G \times L.$$

Обозначим бесконечномерный столбец $c = \|c_2,\ \ c_3,\ \ c_4, \dots\|^T$ – некоторое решение системы (12), обозначив нулевым верхним индексом c^0 стационарное решение. Тогда система (12) может быть переписана в новых обозначениях:

$$\frac{dc}{d\tau} = B \times (c - c^0).$$

Система еще упростится, если мы введем новую переменную $y = c - c^0$:

$$\frac{dy}{d\tau} = B \times y. \qquad (14)$$

Умножим слева это уравнение на $(L \times y)^T$:

$$(L \times y)^T \times \frac{dy}{d\tau} = (L \times y)^T \times B \times y.$$

Пользуясь разложением на множители (13) и постоянством коэффициентов в матричном представлении операторов, найдем из предыдущего выражения:

$$\frac{1}{2}\frac{d}{d\tau}(y^T \times L \times y) = (L \times y)^T \times G \times (L \times y). \qquad (15)$$

Рассмотрим пару квадратичных функционалов $U(z) = z^T \times G \times z$ и $V(z) = z^T \times L \times z$, где $z = \|z_2,\ \ z_3,\ \ z_4, \dots\|^T$ – бесконечномерный столбец с действительными компонентами. Используя матричное представление для операторов из выражения (13), найдем

$$U(z) = (1+\sigma)\left(\sum_{k=2}^{\infty}(-{z_k}^2 + z_k z_{k+1})\right) =$$

$$= \frac{1}{2}(1+\sigma)\left(-{z_2}^2 - \sum_{k=2}^{\infty}(z_k - z_{k+1})^2\right),$$

из этого представления явно видно, что $U(z) \leq 0$ отрицательно определен, причем нулевое значение достигается только при нулевом аргументе. Что касается второго функционала, он, поскольку его матричное представление имеет диагональный вид, может быть представлен как

$$V(z) = \sum_{k=2}^{\infty} \alpha_k {z_k}^2,$$

очевидно положительно определен $V(z) \geq 0$, и его нулевое значение также достигается только при нулевом аргументе. Тогда равенство (15) приводится к следующему виду:

$$\frac{1}{2}\frac{d}{d\tau}(V(y)) = U(L \times y).$$

Отсюда, если функционал $V(y) > 0$ на некотором решении уравнения (14) отличен от нуля, то он убывает к нулю $\frac{d}{d\tau}\big(V(y)\big) < 0$, причем ноль достигается только на стационарном решении $y = \|0, \quad 0, \quad 0, \dots\|^T$. Следовательно, и уравнение (14) и исходная система (12) в рассматриваемом случае имеют единственное стационарное решение, которое является асимптотически устойчивым.

Литература

1. Becker R. and Döring W. Kinetische behandlung der keimbil- dung in übersättigen dämpfern // *Ann. Physik*, **24** (1935), 719–752.
2. Flory P. J. Principles of Polymer Chemistry. Cornell University Press, Ithaca, NY, 1953.
3. Ball J., Carr J., Penrose O. The Becker-Döring cluster equations: basic properties and asymptotic behavior of solutions // *Comm. Math. Phys*., **104** (1986), 657–692.
4. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. В 10 т. Т VI Физическая кинетика. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2001. — 736 с.
5. Черчиньяни К. Теория и приложение уравнения Больцмана, М.: "Мир", 1978. — 496 с.
6. Батищева Я.Г., Веденяпин В.В. II-й закон термодинамики для химической кинетики // Математическое моделирование, 2005. Т. 17. № 8. С. 106-110.