

**ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЯ
СМОЛУХОВСКОГО С ДОПОЛНИТЕЛЬНЫМИ
ЭФФЕКТАМИ НУКЛЕАЦИИ**

Заказ Роберт Тамазович

Студент

Факультет ВМК МГУ имени М. В. Ломоносова, Москва, Россия

E-mail: s02250418@gse.cs.msu.ru

Научный руководитель — Матвеев Сергей Александрович

Совместное протекание коагуляции и нуклеации частиц играет ключевую роль на заключительных стадиях фазовых переходов при формировании микроструктуры материалов, росте кристаллов в пересыщенных растворах и эволюции полидисперсных систем в различных технологических процессах.

Динамика ансамбля частиц с учетом обоих механизмов описывается интегро-дифференциальным уравнением типа Смолуховского, дополненным диффузионным и миграционным потоками [1]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{\partial \mathcal{I}}{\partial v} = & \frac{1}{2} \int_0^v \mathcal{A}(w, v-w) \varphi(w, t) \varphi(v-w, t) dw - \\ & - \varphi(v, t) \int_0^\infty \mathcal{A}(w, v) \varphi(w, t) dw, \end{aligned}$$

где $\varphi(v, t)$ — функция распределения частиц по объему v в момент времени t , $\mathcal{I} = (dv/dt)\varphi - \mathcal{D}_v \partial \varphi / \partial v$ — поток частиц, обусловленный Оствальдовским созреванием, а $\mathcal{A}(w, v)$ — ядро коагуляции, описывающее частоту столкновений частиц объемов w и v , известное из физики процесса. Система замыкается уравнением баланса массы, а также граничными условиями затухания на бесконечности $\varphi \xrightarrow{\xi \rightarrow \infty} 0$, $\frac{\partial \varphi}{\partial \xi} \xrightarrow{\xi \rightarrow \infty} 0$.

В данной работе численно исследуется поведение решений уравнения коагуляции-созревания для различных начальных распределений частиц по объему. В основе численного метода лежит разработанная ранее методология решения прямых задач коагуляции [3], дополненная разностной аппроксимацией производных.

Предложенная численная схема в случае постоянного ядра коагуляции и экспоненциального начального распределения частиц дает аппроксимацию, согласующуюся с недавно найденным аналитическим решением [2].

Наши численные расчеты демонстрируют тенденцию ансамбля частиц асимптотически приближаться к универсальному распределению частиц по объему по прошествии достаточно длительного времени для достаточно больших частиц, независимо от того, каким было начальное распределение частиц по объему. Этот факт обобщает ранее доказанную сходимостъ функции распределения чистой коагуляции к распределению Шумана [4], а также функции распределения чистого вызревания Оствальда к распределению Лифшица-Слизова [2].

Работа выполнена при поддержке проекта Российского научного фонда 25-21-00047, <https://rscf.ru/project/25-21-00047/>.

Литература

1. Friedlander S. K. *Smoke, Dust, and Haze: Fundamentals of Aerosol Dynamics* // New York, USA, Oxford University Press, 2000.
2. Makoveeva E. V., Alexandrov D. V., An exact analytical solution to unsteady population balance equation with particles coagulation // *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation* V. 131, 107879, 2024.
3. Matveev S. A., Smirnov A. P., Tyrtysnikov E. E. A fast numerical method for the Cauchy problem for the Smoluchowski equation // *Journal of Computational Physics*. V. 282, P. 23-32, 2015.
4. Schuman T. E. W., Theoretical aspects of the size distribution of fog particles // *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society* V. 66, P. 195-208, 66.