ISSN 2224-5227

2015 • 6

ҚАЗАҚСТАН РЕСПУБЛИКАСЫ
ҰЛТТЫҚ ҒЫЛЫМ АКАДЕМИЯСЫНЫҢ

БАЯНДАМАЛАРЫ

ДОКЛАДЫ

НАЦИОНАЛЬНОЙ АКАДЕМИИ НАУК
РЕСПУБЛИКИ КАЗАХСТАН

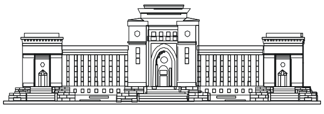
REPORTS

OF THE NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES
OF THE REPUBLIC OF KAZAKHSTAN

ЖУРНАЛ 1944 ЖЫЛДАН ШЫҒА БАСТАҒАН

ЖУРНАЛ ИЗДАЕТСЯ С 1944 г.

PUBLISHED SINCE 1944



ҚАЗАҚСТАН РЕСПУБЛИКАСЫ
ҰЛТТЫҚ ҒЫЛЫМ АКАДЕМИЯСЫНЫҢ

БАЯНДАМАЛАРЫ **2015 • 6**

ДОКЛАДЫ **2015 • 6**
НАЦИОНАЛЬНОЙ АКАДЕМИИ НАУК
РЕСПУБЛИКИ КАЗАХСТАН

«Доклады Национальной академии наук Республики Казахстан» ISSN 2224-5227
Собственник: Республиканское общественное объединение «Национальная академия наук Республики Казахстан» (г. Алматы)
Свидетельство о постановке на учет периодического печатного издания в Комитете информации и архивов Министерства культуры и информации Республики Казахстан **№5540-Ж**, выданное 01.06.2006 г.
Периодичность: 6 раз в год. Тираж: 3000 экземпляров
Адрес редакции: 050010, г.Алматы, ул.Шевченко, 28, ком.218-220, тел. 272-13-19, 272-13-18
http://nauka-nanrk.kz. reports-science.kz
Адрес типографии: ИП «Аруна», г.Алматы, ул.Муратбаева, 75

REPORTS **2015 • 6**

OF NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF THE
REPUBLIC OF KAZAKHSTAN

Reports of the National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan.
ISSN 2224-5227
Owner: RPA "National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan" (Almaty)
The certificate of registration of a periodic printed publication in the Committee of Information and Archives of the Ministry of Culture and Information of the Republic of Kazakhstan N 5540-Ж, issued 01.06.2006
Periodicity: 6 times a year
Circulation: 2000 copies
Editorial address: 28, Shevchenko str., of.219-220, Almaty, 050010, tel. 272-13-19, 272-13-18,
http://nauka-nanrk.kz / reports-science.kz
Address of printing house: ST "Aruna", 75, Muratbayev str, Almaty

REPORTS OF THE NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF THE REPUBLIC OF KAZAKHSTAN
ISSN 2224-5227
Volume 6, Number 304 (2015), 65 – 73

UDC 530.1

ON THE PROBLEM OF ACCOUNTING THE MULTIPLE IMPACTS UNDER MODELING THE AGGREGATION PROCESSES IN DISPERSE SYSTEMS

D. Dayrabay, V.G. Golubev, O.S. Balabekov, A.M. Brener
din_303@mail.ru

[1]State University of South Kazakhstan after M. Auezov, Shymkent
[2]South Kazakhstan State Pedagogical Institute, Shymkent

Key words: Disperse systems, multiple aggregation, Becker-Doering equation, relaxation phenomena.

Abstract. The article presents an analysis of possible approaches to modelling a many-particle aggregation in dense disperse systems. It is shown that the account of many-particle collisions may be important at the initial period of the process. It is especially correct in the case where there are sources of low-orders clusters in the system. The probability of such collisions may be sufficient for the formation of aggregates of particles. This hypothesis is assumed to be dependent on the ratio of orders of interacting clusters. The accordance of solutions of the Smoluchowski binary coagulation equation with the hypothesis about dominating the contribution of binary collisions in the kinetics of the aggregation process has been discussed. It is shown that as part of the original concept of the Smoluchowski equation, the probability of multiple collisions of clusters of different orders can be estimated by the product of their relative concentrations. Usually, it is considered that the probability of the occurrence of multiple collisions is much smaller that the probability of binary collisions. However, it is not doubt only on the long time description. The work explores how various products of the relative concentrations of the clusters change over time according to the Smoluchowski equation under the different types of coagulation kernels. In the paper it is justified the hypothesis that under the interaction between clusters with high-different orders, the probability of formation of the high-order cluster as a result of a many-particle aggregation can be comparable in value with the probability of a binary aggregation of clusters with close orders. As the result the correct forms of generalized kinetic equations based both on the Smoluchowski equation and on the Becker-Döring model have been submitted and discussed. It is shown that generalized Becker-Döring model is preferable for describing many-particle aggregation processes.

УДК 530.1

О проблеме учета множественных столкновений при моделировании процессов агрегации в дисперсных системах

Д. Дайрабай[1], В.Г. Голубев[1], О.С. Балабеков[2], А.М. Бренер[1]
din_303@mail.ru

[1]Южно-Казахстанский государственный университет им. М.Ауэзова, г. Шымкент
[2]Южно-Казахстанский государственный педагогический институт, г. Шымкент

Ключевые слова: дисперсная система, массовая агрегация, уравнение Беккера-Дёринга, релаксационные явления.

Аннотация. В статье представлен анализ возможных подходов к моделированию многочастичной агрегации в плотных дисперсных системах. Показано, что учет множественных столкновений частиц может играть важную роль в начальный период процесса. Это особенно справедливо в случае, когда в системе существуют источники кластеров низких порядков. Вероятность таких столкновений может быть достаточной для образования агрегатов частиц. Предполагается, что эта гипотеза зависит от соотношения порядков взаимодействующих кластеров. Обсуждается соответствие решений уравнения бинарной коагуляции Смолуховского с гипотезой о доминирующем вкладе бинарных столкновений в кинетике процесса агрегации. Показано, что в рамках первоначальной концепции уравнения Смолуховского, вероятность многократных столкновений кластеров различных порядков можно оценить по произведению их относительных концентраций. Как правило, считается, что вероятность возникновения многократных столкновений значительно меньше, чем вероятность бинарных столкновений. Тем не менее, это несомненно только на продолжительных временах процесса. В работе исследуется, как различные произведения относительных концентраций кластеров могут изменяться с течением времени в соответствии с уравнением Смолуховского при различных типах коагуляционных ядер. В работе обосновано предположение, что при взаимодействии между кластерами с сильно различающимися порядками, вероятность формирования кластера высокого порядка в результате агрегирования многих частиц может быть сравнима по вкладу в процесс с вероятностью бинарной агрегации кластеров с близкими порядками. В результате выведены корректные формы обобщенных кинетических уравнений, основанные как на уравнения Смолуховского, так и на модели Беккера-Дёринга. Показано, что обобщенная модель Беккера-Дёринга является предпочтительным для описания процессов агрегации многих частиц.

Введение

В известных работах [1-5] предлагаются модели динамики массовой агрегации дисперсных биохимических систем. Модели состоят из интегро-дифференциальных уравнений адвекции-диффузии, сформулированных с учетом возможности нелокального взаимодействия частиц во внешнем поле на больших расстояниях. Другой подход к описанию агрегационных процессов осуществляется на основании модели среднего поля. При этом используются уравнения коагуляции Смолуховского, записанные в дискретной или континуальной формах [6-8].

В то же время, уравнение Смолуховского и модель Беккера-Дёринга имеют физически ясное обоснование только для бинарной коагуляции. Это ограничение оказывается не вполне корректным в ситуации массовой, многочастичной агрегации в плотных системах [9-12]. Так называемое многочастичное уравнение коагуляции Смолуховского является континуальной моделью, и это ограничение не позволяет детально описать механизм агрегации с плотных дисперсных системах [13-15].

В данной работе мы предлагаем обсудить возможности обобщения дискретного бинарного уравнения Смолуховского, а также модели Беккера – Деринга с целью вывода кинетического уравнения агрегации для плотных систем, когда учитывается сопоставимый порядок вероятностей многочастичного взаимодействия кластеров различных порядков и бинарных столкновений. Вероятность таких столкновений и образования кластеров более высоких порядков предполагается зависящей от соотношения порядков взаимодействующих кластеров [16, 17]. В нашей работе мы показываем, что при взаимодействии между кластерами с сильно различающимися порядками, вероятность формирования новых кластеров более высокого порядка в результате многочастичного агрегирования сопоставима с вероятностью бинарной агрегации кластеров с близкими порядками. Это может быть объяснено увеличением концентрации активных центров на поверхности кластеров высокого порядка [16].

На базе этих предположений в данной работе обсуждаются кинетические уравнения агрегации многих частиц в плотных дисперсных систем, полученные с учетом многочастичного взаимодействия кластеров .

Формальная структура локальных кинетических уравнений агрегации частиц в дисперсных системах, с учетом многочисленных столкновений при формировании кластеров разных порядков, была предложена, например, в работе [18]. Однако, как отмечает сам автор [18], речь идет только о макро-кинетическом описании, и вопрос оценки вклада столкновений частиц различных порядков в кинетику процесса коагуляции не рассматривается. Таким образом, предлагается чисто формальное обобщение уравнения Смолуховского для бинарной коагуляции. На наш взгляд, в данной проблеме необходимо иметь в виду два основных положения. Во-первых, важно сравнить вероятности бинарных и многократных столкновений кластеров различных порядков во временной динамике при изменении плотности дискретной системы. Во-вторых, нужно получить оценки для порядков коагуляционных ядер, в зависимости от порядков взаимодействующих кластеров при многочастичных столкновениях [19-21]. Мы предлагаем также интегро-дифференциальную модифицированную модель, позволяющую учитывать изменение активности кластеров в зависимости от их возраста. Т.е. в этой модели можно говорить об агрегации с учетом особенностей систем с памятью.

Методы исследования

Сравнительный анализ вероятностей бинарных и многочастичных столкновений на разных временах

Уравнение Смолуховского для бинарной коагуляции выглядит следующим образом [22]

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{i-1} N_{i-j,j} C_{i-j} C_j - C_i \sum_{j=1}^{\infty} N_{i,j} C_j \qquad (1)$$

Здесь C_i - концентрация i -меров, $N_{i,j}$ -коагуляционные ядра, t -время.

Вначале обсудим соответствие решений уравнения бинарной коагуляции Смолуховского с гипотезой о доминирующем вкладе бинарных столкновений в кинетику процесса агрегации. Согласно исходной концепции уравнения Смолуховского (которая, по существу, аналогична концепции уравнения Аррениуса в химической кинетики), вероятность многочастичных столкновений кластеров различных порядков может быть оценена по произведению их относительных концентраций.

При этом считается, что вероятность возникновения многочастичных столкновений значительно меньше, что вероятность двойных столкновений [6]. Тем не менее, можно показать, что это корректно только на длительных временных интервалах.

Действительно, рассмотрим, как различные произведения относительных концентраций кластеров могут изменяться с течением времени в соответствии с бинарным уравнением Смолуховского при различных типах коагуляционных ядер.

Пусть справедливы монодисперсные начальные условия [22]

$$C_r = 0 \text{ for } r > 1 \text{ and } C_1(0) = 1. \qquad (2)$$

Форма коагуляционных ядер зависит от принятой модели [22]. Постоянные ядра могут быть приняты для случая броуновского коагуляции, аддитивные ядра допустимы для гравитационного агрегирования, а мультипликативные ядра могут быть использованы для описания процесса полимеризации.

В случае постоянных ядер $N_{i,j}$=1уравнение Смолуховского имеет явное решение [22]

$$C_r(t) = \frac{4}{(t+2)^2}\left(\frac{t}{t+2}\right)^{r-1}. \qquad (3)$$

Используя решение (3) оценим период времени, в течение которого, нижеследующее неравенство может быть удовлетворено

$$C_r C_s \le \alpha \prod_{\sum p_i = r+s} C_{p_i} \qquad (4)$$

Легко видеть, что

$$0 < t \le \sqrt{1 + 4\alpha^{1/(N-2)}} - 1 \qquad (5)$$

В частности, если $\alpha = 10$ и $N = 3$ получаем, что вклад бинарных и тройных столкновений может иметь сопоставимые порядки в начальный период времени. Для случаев, в которых уравнение Смолуховского имеет явные решения, а именно: для аддитивных $N_{i,j} = \frac{1}{2}(r+s)$ и мультипликативных $N_{i,j} = rs$ ядер, получается аналогичный результат. Другими словами, существует начальный период, когда вклады двойных и кратных столкновений в кинетику процесса агрегации могут быть сопоставимы.

Однако, так как многочастичные столкновения вообще не рассматриваются в рамках уравнения (1), можно сказать, что полученные явные решения находятся в противоречии с принятыми физическими предположениями на временах, оценка которых дается соотношением (5). Более того, используя метод динамического масштабирования [23], заключаем, что подобная ситуация будет наблюдаться для всех типов ядер коагуляции, подчиняющихся условиям однородности [22, 23]:

$$N_{ki,kj} = k^{\lambda} N_{i,j} \,. \tag{6}$$

Действительно, общий вид решения агрегационного уравнения по методу динамического масштабирования выглядит следующим образом

$$C_r(t) \sim \frac{1}{s(t)^{\tau}}\, g\left(\frac{r}{s(t)}\right). \tag{7}$$

Рассмотрим тогда соотношение между произведениями $C_r C_p$ и $C_r C_{p/2} C_{p/2}$:

$$\Lambda_p = \frac{1}{s(t)^{\tau}} \frac{g^2\left(\frac{p}{2s(t)}\right)}{g\left(\frac{p}{s(t)}\right)} \,. \tag{8}$$

Однако, в соответствии с условиями (2), в начальный период будет наблюдаться ситуация, когда концентрации кластеров малых порядков существенно превышает концентрации кластеров высших порядков, особенно при высокой начальной концентрации мономеров. Таким образом, мы можем ожидать, что для любых p будет существовать определенный начальный период T_p, который характеризуется соотношением $\Lambda_p \sim O(1)$. Этот вывод должен быть корректным для химических и плотных биохимических дисперсных систем, в которых существуют источники кластеров низких порядков [24, 25].

Результаты исследования

Модели многочастичной агрегации

Формальное обобщение уравнения Смолуховского применительно к многочастичным столкновениям можно записать в виде [26, 27]

$$\frac{dC_i}{dt} = \frac{1}{n!} \sum_{j_1 + j_2 + \cdots + j_n = i} N(j_1, j_2, \ldots, j_n) C_{j_1} C_{j_2} \cdots C_{j_n} - \frac{C_i}{(n-1)!} \sum_{j_1, j_2, \ldots j_{n-1} = 1}^{\infty} N(i, j_1, j_2, \ldots, j_{n-1}) C_{j_1} C_{j_2} \ldots C_{j_{n-1}} \tag{9}$$

Явные решения уравнения (8) может быть получено с помощью метода производящих функций для некоторых специальных видов ядер агрегации [22, 23, 28].

Тем не менее, эту форму нельзя считать универсальной. Для корректного описания перехода от бинарных к многочастичным столкновениям в плотной системе кинетическое уравнение должно учитывать столкновения без какого-либо априорного ограничения числа сталкивающихся частиц. Поэтому наиболее общее уравнение можно записать в виде

$$\frac{dC_i}{dt} = \sum_{n=2}^{\mathrm{P}(i)} A_n - C_i \sum_{n=2}^{\infty} B_n \,, \tag{10}$$

Здесь

$$A_n = \frac{1}{n!} \sum_{j_1 + j_2 + \cdots + j_n = i} N(j_1, j_2, \ldots, j_n) C_{j_1} C_{j_2} \cdots C_{j_n} \,; \tag{11}$$

$$B_n = -\frac{1}{(n-1)!} \sum_{j_1, j_2, \ldots j_{n-1} = 1}^{\infty} N(i, j_1, j_2, \ldots, j_{n-1}) C_{j_1} C_{j_2} \ldots C_{j_{n-1}} \,. \tag{12}$$

$\mathrm{P}(i)$ в уравнении (10) – это число всех возможных различных разбиений целого числа i на слагаемые.

Математическое исследование процессов агрегации в плотных систем с учетом столкновений многих частиц осуществлялось в работе [18]. В то же время основные выводы этой работы имеют ограниченное практическое значение, так как они были получены для квазилинейной аппроксимации кинетической модели [18]. Кроме того, строгий анализ модели (10) становится особенно сложным, поскольку верхний предел в первой сумме в уравнении (10), не может быть установлен с помощью простой формулы.

Такая неполнота описания, присущая модели (10), может быть устранена при выводе обобщенного уравнения агрегации на основе модели Беккера-Дёринга [22]:

$$\frac{dC_i}{dt} = J_{i-1}(t) - J_i(t), \quad (i \geq 2), \tag{13}$$

где

$$J_k(t) = a_k C_k(t) C_1(t) - b_{k+1} C_{k+1}(t). \tag{14}$$

Обобщенное кинетическое уравнение приобретает теперь вид

$$\frac{dC_i}{dt} = \sum_{k=1}^{i-1}\left(a_{(i-k),k} C_{i-k} (C_1)^k - b_{i,k} C_i\right) - \sum_{k=1}^{\infty}\left(a_{(i+k),k} C_i (C_1)^k - b_{(i+k),k} C_{i+k}\right). \tag{15}$$

Здесь:

$a_{r,k}$ - ядро агрегации кластера порядка r с k мономерами; $b_{r,k}$ - ядро дезагрегации (фрагментации) кластера порядка r с выбросом k мономеров.

Главный вопрос, возникающий для всех рассмотренных моделей агрегации, это вопрос о том, как значение коагуляционных ядер зависит от порядков взаимодействующих кластеров. Для обобщенного уравнения Смолуховского этот вопрос представляется в общем виде очень сложным и до сих пор неясным [29]. Для n - частичной коагуляции интенсивность слияния кластеров может быть оценена по следующей формуле [30]

$$N(j_1, j_2, \ldots j_n) = s_{j_1} s_{j_2} \ldots s_{j_n}. \tag{16}$$

Здесь

$$s_j = j^{\omega}, \tag{17}$$

где $\omega \leq 1$ - геометрический фактор, характеризующий поверхность j-мера. Для компактных кластеров можно положить $\omega \sim 2/3$, но для фрактальных кластеров показатель ω должен определяться на основе фрактальной размерности кластера. Для многочастичного процесса агрегации в соответствии с модифицированной моделью Беккер-Дёринга (15), мы предлагаютс новые оценки. А именно, разумно ввести некоторое предельное количество мономеров, которые могут быть захвачены поверхностью большой r-мера [31]. Этот предел может быть оценен через число активных реакционных центров на поверхности кластера [32, 33].

Таким образом, можно получить следующие оценки [31]

$$a_{r,k} \sim \beta r^{\omega} \sigma^{\mu(k-k^*)}, \tag{18}$$

$$k_{\max} = k^* \sim \delta r^{\omega}, \tag{19}$$

где β - коэффициент эффективности столкновения, характеризующий долю столкновений. Завершающихся захватом частиц; σ - сечение столкновения, μ и δ - коэффициенты, зависящие от свойств сплошной среды.

Релаксационные явления

Необходимо отметить, что само понятие множественного или многочастичного столкновения требует учета релаксационных явлений. т.к., имеется в виду определенный промежуток времени, в течение которого происходит столкновение. Тогда число столкновений, заканчивающихся в течение этого времени, и может быть определено как порядок многочастичного столкновения.

Для того, чтобы оценить время релаксации при бинарном столкновении мы используем метод релаксационных ядер переноса [34].

Тогда кинетическое уравнение для бинарной агрегации в дисперсной системе с учетом времени релаксации столкновений можно записать следующим образом [35]

$$\frac{dC_i}{dt}=\frac{1}{2}\sum_{j=1}^{i-1}\int_0^t\int_0^t N_{j,i-j}C_j(t_1)C_{i-j}(t_2)dt_1dt_2-\sum_{j=1}^{\infty}\int_0^t\int_0^t N_{i,j}C_i(t_1)C_j(t_2)dt_1dt_2\,, \qquad (20)$$

где ядра $N_{i,j}$ являются функциями времен задержки $(t-t_1)$ и $(t-t_2)$.

Показано, что простейший вид модельного уравнения для элементов агрегационной матрицы выглядит следующим образом [34, 36]

$$r_i\frac{\partial N_{i,j}}{\partial(t-t_1)}+r_j\frac{\partial N_{i,j}}{\partial(t-t_2)}+\frac{f_{i,j}^0}{\tau_{i,j}}N_{i,j}=0\,. \qquad (21)$$

В уравнении (21) коэффициенты r_i и релаксационные времена $\tau_{i,j}$ играют роль управляющих параметров, параметр f зависит от свойств окружающей сплошной среды. Предложенная форма позволяет учесть возраст частиц и эффекты памяти:

$$N_{i,j}=\eta_{i,j}^0\exp\left(-\frac{f_{i,j}^0}{2\tau_{i,j}}\left(\frac{t-t_1}{r_i}+\frac{t-t_2}{r_j}\right)\right). \qquad (22)$$

После некоторых преобразований соответствующее кинетическое уравнение приобретает следующую форму [34]:

$$\varepsilon\frac{d^2C_i}{d\theta^2}+\frac{dC_i}{d\theta}=2\varepsilon^2\sum_1\overline{\eta}_{j,i-j}\left[C_jC_{i-j}-\varepsilon\frac{d}{d\theta}(C_jC_{i-j})\right]-4\varepsilon^2\sum_2\overline{\eta}_{i,j}\left[C_iC_j-\varepsilon\frac{d}{d\theta}(C_iC_j)\right]+\Phi\,. \quad (23)$$

Здесь $\varepsilon=\tau_{i,j}/T$, где T - характеристическое время процесса.

Функция Φ в уравнении (22) содержит фактор $-\varepsilon^2\exp\left(-\frac{\theta}{2\varepsilon}\right)$ ($\theta=t/T$ - безразмерное время).

Этот фактор таков, что его порядок может оказаться сравнимым с ε^2 на малых временах процесса агрегации θ_{in}. Для оценки этого малого времени получаем соотношение

$$\theta_{in}\sim-\varepsilon\ln\varepsilon\,. \qquad (24)$$

Соотношение (24) дает оценку времени столкновения.

Для физической интерпретации зависимости коагуляционных ядер от времени жизни (или возраста) кластера можно предложить следующее эвристическое толкование.

Агрегационная активность кластера зависит от числа активных центров на его поверхности. В случае фрактального кластера эта поверхность имеет сложный вид и переменную фрактальную размерность. Если прекратится процесс агрегации, то через некоторое время завершится структурирование кластера, и он обретет структуру, характеризующуюся минимумом свободной энергии поверхности. Однако, если происходит непрерывный захват новых частиц, то между моментами захвата кластер «проживает» определенную историю. Т.е. проходит часть времени структурирования до обретения кластером стабильной структуры, и в каждый такой момент обретенная структура вновь возмущается. Это описание иллюстрируется рисунком 1.

При присоединении новой частицы, т.е. при столкновении и захвате, за время одной коллизии возрастает в течение времени коллизии свободная энергия поверхности кластера. А затем происходит релаксация поверхности до нового значения свободной энергии, которая прерывается новой коллизией. Таким образом, каждая коллизия начинается в новых условиях, определяемых порядком кластера и его возрастом.

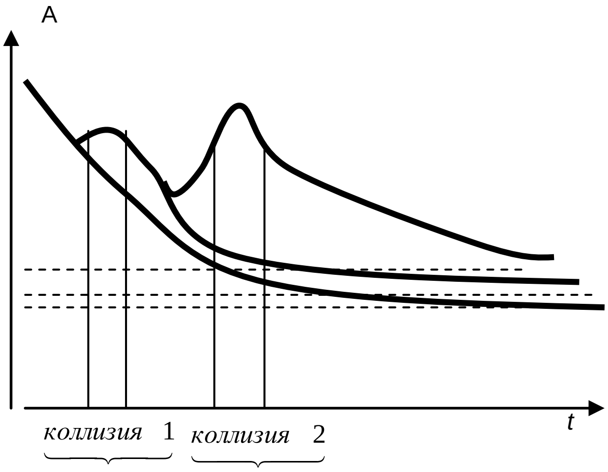


Рисунок 1. Изменение свободной энергии А поверхности кластера в процессе присоединения новых частиц (коллизии 1 и 2)

Выводы

риведен анализ возможных подходов к моделированию многочастичной агрегации в плотных дисперсных системах. Показано, что учет столкновений многих частиц может быть особенно важен в начальный период процесса и в случае, когда в системе есть источники кластеров низших порядков. Представлены и обсуждены корректные формы обобщенных кинетических уравнений, основанных как на уравнения Смолуховского, так и на модели Беккер-Дёринга. Показано, что обобщенная модель Беккера-Дёринга является предпочтительной для описания процессов многочастичной агрегации в плотных системах

ЛИТЕРАТУРА

[1] Skellam J.G., Random dispersal in theoretical populations, 1951, Biometrica, 38, 196-218.
[2] Murray J.D., Mathematical Biology, 1989, Springer Verlag, New York.
[3] Cohen D.S, Murray J.D., A generalized diffusion model for growth and dispersal in a population, 1981, J. Math. Biol., 12, 237-249.
[4] Levin S.A., Segel L.A., Pattern generation in space and aspect, 1985, SIAM. Rev., 27, 45-67.
[5] Mogilner A., Edelstein-Keshet L., A non-local model for a swarm, 1999, J. Math. Biol., Vol. 38, 534-570.
[6] Li X., Logan B.E. Collision Frequencies of Fractal Aggregates with Small Particles by Differential Sedimentation, 1997, Envir. Sci., Techn., 31, 1229-1236.
[7] Logan B.E., Environmental Transport Processes, 2012, Wiley, Hoboken, New Jersey, 479.
[8] Menon G., Pego R.L., Kinetics of a precipitation from supersaturated solid solutions, 2004, Comm. on Pure and Appl. Math, vol. LVII, 1197-1232.
[9] Doering C.R., ben-Abraham, Interparticle distribution functions and rate equations for diffusion-limited reactions, 1988, Phys. Rev., A 38, 3035.
[10] Doering C.R., ben-Abraham, Diffusion-limited coagulation in the presence of particle input: exact results in one dimension, 1989, Phys. Rev. Lett, 62, 2563.
[11] Duncan D.B., Soheili A.R., Approximating the Becker-Döring Cluster Equations, 2000, Comm. Math. Phys., Vol. 119, 1-31.
[12] Ball J.M., Carr J., Penrose O., The Becker-Döring Cluster Equations: Basic Properties and Asymptotic Behaviour of Solutions, 1986, Commun Math. Phys. 104, 657-692.
[13] Aldous D.J., Deterministic and stochastic models for coalescence (aggregation, coagulation: review of the mean-field theory for probabilists), 1999, Bernoulli, 5, 3.
[14] 14. Blackman J.A., Marshall A., Coagulation and Fragmentation in cluster-monomer reaction models, 1994, J. Phys. A.: Math. Gen. 27, 725-740.
[15] Boehm A.B., Poor C., Grant S.B., Particle coagulation and the memory of initial conditions, 1998, J. Phys. A 31, 9241.
[16] Ernst M.H., Kinetics of clustering in irreversible aggregation, 1986, in Fractal in Physics, Pietronero L., Tosatti E., Eds., North-Holland, Amsterdam.
[17] Fadda S., Cincotti A., Cao G., Modelling breakage and reagglomeration during fine dry grinding in ball milling device, 2009, Chem. Eng. Trans. (CET), 17, 687-693.
[18] Penkov N.V., Coagulation processes in dispersed systems, 1992, Thes. PhD, Moscow, Karpov Inst.,
[19] Barabasi A-L, Vicsek T., Multifractality of self-affine fractals, 1991, Phys. Rev. A 44, No4, 2730-2733.
[20] Bellomo N, Toskani G., On the Cauchy problem for the nonlinear Boltzmann equation: global existence,

uniqueness and asymptotic stability, 1985, Jour. Math. Phys., Vol.26, No2, 334-338.

[21] Di Perna R.J., Lions P.L., Solutions globales de l'equation de Bolzmann, 1988, C.R. Acad. Sc. Paris, 306, 343-346.

[22] Wattis J.A.D., An introduction to mathematical models of coagulation-fragmentation processes: A discrete

[23] Leyvraz F., Scaling theory and exactly solved models in the kinetics of irreversible aggregation, 2003, Phys. Reports, 383, 95-212.

[24] Friedlander S.K., Smoke, Dust and Haze, 2000, Oxford University Press, Oxford.

[25] Davies S.C., King J.R., Wattis J.A.D., The Smoluchowski coagulation equations with continuous injection, 1999, J. Phys. A 32, 7745.

[26] Krapivsky P.L., Aggregation processes with *n*-particle elementary reactions, 1991, J. Phys., A 24, 4697.

[27] Krivitski D.S., Numerical solution of the Smoluchowski kinetic equation and asymptotics of the distribution function, 1995, J. Phys., A 28, 2025.

[28] Zahnov J.C., Maerz J., Feudel U., Particle-based modelling of aggregation and fragmentation processes: Fractal-like aggregates, 2011, Physica D, 240, 882-893.

[29] Yu Jiang, Hu Gang, Generalized Smoluchowski equation with gelation, 1989, Phys. Rev. B 39, 4659.

[30] Yu Jiang, Hu Gang, Long-time behaviour of the cluster size distribution in joint coagulation processes, 1989, Phys. Rev. B 40, 661.

[31] Brener A.M., 2014, Model of many particle aggregation in dense particle systems, Chem. Eng. Trans. (CET), Vol 38, 145-150.

[32] Slemrod M., Coagulation-diffusion systems: derivation and existence: derivation and existence of solutions for the diffuse interface structure equations, 1990, Physica D, 46, 351-366.

[33] Spicer P.T., Pratsinis S.E., Coagulation and Fragmentation: Universal Steady-State Particle-size Distribution, 1996, AIChE J., vol. 42, No6, 1612-1620.

[34] Brener A.M., Nonlocal Equations of the Heat and Mass Transfer in Technological Processes, 2006, Theor. Found. Chem. Eng, Vol. 40, 564-573.

[35] Brener A.M., Nonlocal Model of Aggregation in Polydispersed Systems, 2011, Theor. Found. Chem. Eng, Vol. 45, 349-353.

[36] Brener A.M., Balabekov B.Ch., Kaugaeva A.M., 2009, Non-local model of aggregation in uniform polydispersed systems, Chem. Eng. Trans. (CET), Vol 17, 783-789.

REFERENCES

[1] Skellam J.G., Random dispersal in theoretical populations, 1951, Biometrica, 38, 196-218.

[2] Murray J.D., Mathematical Biology, 1989, Springer Verlag, New York.

[3] Cohen D.S, Murray J.D., A generalized diffusion model for growth and dispersal in a population, 1981, J. Math. Biol., 12, 237-249.

[4] Levin S.A., Segel L.A., Pattern generation in space and aspect, 1985, SIAM. Rev., 27, 45-67.

[5] Mogilner A., Edelstein-Keshet L., A non-local model for a swarm, 1999, J. Math. Biol., Vol. 38, 534-570.

[6] Li X., Logan B.E. Collision Frequencies of Fractal Aggregates with Small Particles by Differential Sedimentation, 1997, Envir. Sci., Techn., 31, 1229-1236.

[7] Logan B.E., Environmental Transport Processes, 2012, Wiley, Hoboken, New Jersey, 479.

[8] Menon G., Pego R.L., Kinetics of a precipitation from supersaturated solid solutions, 2004, Comm. on Pure and Appl. Math, vol. LVII, 1197-1232.

[9] Doering C.R., ben-Abraham, Interparticle distribution functions and rate equations for diffusion-limited reactions, 1988, Phys. Rev., A 38, 3035.

[10] Doering C.R., ben-Abraham, Diffusion-limited coagulation in the presence of particle input: exact results in one dimension, 1989, Phys. Rev. Lett, 62, 2563.

[11] Duncan D.B., Soheili A.R., Approximating the Becker-Döring Cluster Equations, 2000, Comm. Math. Phys., Vol. 119, 1-31.

[12] Ball J.M., Carr J., Penrose O., The Becker-Döring Cluster Equations: Basic Properties and Asymptotic Behaviour of Solutions, 1986, Commun Math. Phys. 104, 657-692.

[13] Aldous D.J., Deterministic and stochastic models for coalescence (aggregation, coagulation: review of the mean-field theory for probabilists), 1999, Bernoulli, 5, 3.

[14] Blackman J.A., Marshall A., Coagulation and Fragmentation in cluster-monomer reaction models, 1994, J. Phys. A.: Math. Gen. 27, 725-740.

[15] Boehm A.B., Poor C., Grant S.B., Particle coagulation and the memory of initial conditions, 1998, J. Phys. A 31, 9241.

[16] Ernst M.H., Kinetics of clustering in irreversible aggregation, 1986, in Fractal in Physics, Pietronero L., Tosatti E., Eds., North-Holland, Amsterdam.

[17] Fadda S., Cincotti A., Cao G., Modelling breakage and reagglomeration during fine dry grinding in ball milling device, 2009, Chem. Eng. Trans. (CET), 17, 687-693.

[18] Penkov N.V., Coagulation processes in dispersed systems, 1992, Thes. PhD, Moscow, Karpov Inst.,

[19] Barabasi A-L, Vicsek T., Multifractality of self-affine fractals, 1991, Phys. Rev. A 44, No4, 2730-2733.

[20] Bellomo N, Toskani G., On the Cauchy problem for the nonlinear Boltzmann equation: global existence, uniqueness and asymptotic stability, 1985, Jour. Math. Phys., Vol.26, No2, 334-338.

[21] Di Perna R.J., Lions P.L., Solutions globales de l'equation de Bolzmann, 1988, C.R. Acad. Sc. Paris, 306, 343-346.

[22] Wattis J.A.D., An introduction to mathematical models of coagulation-fragmentation processes: A discrete

[23] Leyvraz F., Scaling theory and exactly solved models in the kinetics of irreversible aggregation, 2003, Phys. Reports, 383, 95-212.
[24] Friedlander S.K., Smoke, Dust and Haze, 2000, Oxford University Press, Oxford.
[25] Davies S.C., King J.R., Wattis J.A.D., The Smoluchowski coagulation equations with continuous injection, 1999, J. Phys. A 32, 7745.
[26] Krapivsky P.L., Aggregation processes with *n*-particle elementary reactions, 1991, J. Phys., A 24, 4697.
[27] Krivitski D.S., Numerical solution of the Smoluchowski kinetic equation and asymptotics of the distribution function, 1995, J. Phys., A 28, 2025.
[28] Zahnov J.C., Maerz J., Feudel U., Particle-based modelling of aggregation and fragmentation processes: Fractal-like aggregates, 2011, Physica D, 240, 882-893.
[29] Yu Jiang, Hu Gang, Generalized Smoluchowski equation with gelation, 1989, Phys. Rev. B 39, 4659.
[30] Yu Jiang, Hu Gang, Long-time behaviour of the cluster size distribution in joint coagulation processes, 1989, Phys. Rev. B 40, 661.
[31] Brener A.M., 2014, Model of many particle aggregation in dense particle systems, Chem. Eng. Trans. (CET), Vol 38, 145-150.
[32] Slemrod M., Coagulation-diffusion systems: derivation and existence: derivation and existence of solutions for the diffuse interface structure equations, 1990, Physica D, 46, 351-366.
[33] Spicer P.T., Pratsinis S.E., Coagulation and Fragmentation: Universal Steady-State Particle-size Distribution, 1996, AIChE J., vol. 42, No6, 1612-1620.
[34] Brener A.M., Nonlocal Equations of the Heat and Mass Transfer in Technological Processes, 2006, Theor. Found. Chem. Eng, Vol. 40, 564-573.
[35] Brener A.M., Nonlocal Model of Aggregation in Polydispersed Systems, 2011, Theor. Found. Chem. Eng, Vol. 45, 349-353.
[36] Brener A.M., Balabekov B.Ch., Kaugaeva A.M., 2009, Non-local model of aggregation in uniform polydispersed systems, Chem. Eng. Trans. (CET), Vol 17, 783-789.

Дисперстік жүйелердегі агрегация процестерін үлгілеу кезіндегі көптеген қақтығыстарды есептеу проблемалары туралы

Д. Дайрабай[1], В.Г. Голубев[1], О.С. Балабеков[2], А.М. Бренер[1]
din_303@mail.ru
[1]М. Әуезов атындағы Оңтүстік Қазақстан мемлекеттік университеті, Шымкент қаласы
[2]Оңтүстік Қазақстан мемлекеттік педагогикалық институты, Шымкент қаласы

Тірек сөздер: дисперстік жүйе, жаппай агрегация, Беккер-Дёрингтің теңдеуі, релаксациялық құбылыстар.

Аннотация. Мақалада тығыз дисперстік жүйелердегі көпбөлшекті агрегацияны үлгілеу үшін мүмкін тәсілдердің талдауы келтірілген. Процестің бастапқы кезеңінде бөлшектердің көптеген қақтығыстарын есептеу маңызды рөл атқаруы мүмкін екендігі көрсетілген. Жүйелерде төмен тәртіптік кластерлер көздері бар жағдайда, бұл әсіресе әділ. Мұндай қақтығыстардың ықтималдығы агрегаттар бөлшектерінің түзілуіне жеткілікті болуы мүмкін. Бұл гипотеза бір-бірімен әрекет ететін кластерлер тәртіптерінің арасалмағына тәуелді екендігі болжанады. Смохулоскийдің бинарлық ұю теңдеуі шешімдерінің агрегация процесінің кинетикасында бинарлық қақтығыстардың үстем үлесі туралы болжаммен сәйкестігі талқыланады. Смолуховский теңдеуінің бастапқы тұжырымдамасы аясында түрлі тәртіптегі кластерлердің қайта-қайта қақтығыстарының ықтималдығын олардың салыстырмалы қоюлануының жүргізілуі бойынша бағалауға болатыны көрсетілген. Әдетте, қайта-қайта қақтығыстар туындауының ықтималдығы бинарлық қақтығыстар туындауының ықтималдығынан аз болып саналады. Дегенмен, бұл, әлбетте, тек процестің ұзақ уақыттарында байқалады. Жұмыста кластерлердің салыстырмалы қоюланулардың түрлі туындылары ұйығыш ядролардың алуан түрлерінде Смолуховскийдің теңдеуіне сәйкес уақыт өте келе қалай өзгеруі мүмкіндігі зерттеледі. Тәртіптері бір-біріне қатты ұқсамайтын кластерлер арасындағы өзара іс-әрекет кезінде көптеген бөлшектердің бірігуі нәтижесінде жоғары тәртіп кластерінің қалыптасуы ықтималдығы тәртіптері жақын кластерлердің бинарлық бірігуінің ықтималдығымен процеске үлесі бойынша салыстырылуы мүмкін деген болжам дәлелденген. Нәтижесінде Смолуховскийдің теңдеуіне де, Беккер-Деринг үлгісіне де негізделген жалпыланған кинетикалық теңдеулердің дұрыс үлгілері шығарылған. Беккер-Дерингтің жалпыланған үлгісі көптеген бөлшектердің бірігу процесін сипаттау үшін қолайлы болып табылатыны көрсетілген.

Сведения об авторах

ФИО	ученая степень	звание	место работы	e-mail
Д.Д. Дайрабай		магистр	ЮКГУ им.М.Ауэзова	din_303@mail.ru 87788880188
В.Г. Голубев	д.т.н.	профессор	ЮКГУ им.М.Ауэзова	golubev_50@mail/ru 87017356145
О.С. Балабеков	д.т.н.	Академик НАН РК	ЮКГПИ Шымкент	87024419133
А.М. Бренер	д.т.н.	профессор	ЮКГУ им.М.Ауэзова	amb_52@mail.ru 87017198939

Поступила 11.09.2015 г.

PUBLICATION ETHICS AND PUBLICATION MALPRACTICE IN THE JOURNALS OF THE NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF THE REPUBLIC OF KAZAKHSTAN

For information on Ethics in publishing and Ethical guidelines for journal publication see http://www.elsevier.com/publishingethics and http://www.elsevier.com/journal-authors/ethics.

Submission of an article to the National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan implies that the work described has not been published previously (except in the form of an abstract or as part of a published lecture or academic thesis or as an electronic preprint, see http://www.elsevier.com/postingpolicy), that it is not under consideration for publication elsewhere, that its publication is approved by all authors and tacitly or explicitly by the responsible authorities where the work was carried out, and that, if accepted, it will not be published elsewhere in the same form, in English or in any other language, including electronically without the written consent of the copyright-holder. In particular, translations into English of papers already published in another language are not accepted.

No other forms of scientific misconduct are allowed, such as plagiarism, falsification, fraudulent data, incorrect interpretation of other works, incorrect citations, etc. The National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan follows the Code of Conduct of the Committee on Publication Ethics (COPE), and follows the COPE Flowcharts for Resolving Cases of Suspected Misconduct (http://publicationethics.org/files/u2/New_Code.pdf). To verify originality, your article may be checked by the originality detection service Cross Check http://www.elsevier.com/editors/plagdetect.

The authors are obliged to participate in peer review process and be ready to provide corrections, clarifications, retractions and apologies when needed. All authors of a paper should have significantly contributed to the research.

The reviewers should provide objective judgments and should point out relevant published works which are not yet cited. Reviewed articles should be treated confidentially. The reviewers will be chosen in such a way that there is no conflict of interests with respect to the research, the authors and/or the research funders.

The editors have complete responsibility and authority to reject or accept a paper, and they will only accept a paper when reasonably certain. They will preserve anonymity of reviewers and promote publication of corrections, clarifications, retractions and apologies when needed. The acceptance of a paper automatically implies the copyright transfer to the National Academy of sciences of the Republic of Kazakhstan.

The Editorial Board of the National Academy of sciences of the Republic of Kazakhstan will monitor and safeguard publishing ethics.

Правила оформления статьи для публикации в журнале смотреть на сайте:

www:nauka-nanrk.kz

http://www.reports-science.kz/index.php/ru/

Редакторы *М. С. Ахметова, Д. С. Аленов, Т.А. Апендиев*
Верстка на компьютере *С.К. Досаевой*

Подписано в печать 05.12.2015.
Формат 60х881/8. Бумага офсетная. Печать – ризограф.
16,8 п.л. Тираж 2000. Заказ 6.

Национальная академия наук РК
050010, Алматы, ул. Шевченко, 28, т. 272-13-18, 272-13-19