

DARIUSZ WRZOSEK (Warszawa)

Osobliwe własności rozwiązań układu równań Smoluchowskiego

Wstęp. W artykule przedstawimy wybrane zagadnienia dotyczące układów nieskończenie wielu równań różniczkowych, które występują w chemii i innych naukach przyrodniczych jako modele procesów agregacji (koagulacji) i rozpadu molekuł (fragmentacji). Po wprowadzeniu układu równań i opisie jego interpretacji fizycznej przedstawimy te własności rozwiązań, które wyraźnie odróżniają te układy od układów skończenie wielu równań. Chodzi tu przede wszystkim o przykład niejednoznaczności rozwiązań oraz o efekt gwałtownego załamania się prawa zachowania masy w trakcie ewolucji czasowej rozwiązania. Omówimy zarówno rezultaty dotyczące układów równań różniczkowych zwyczajnych jak i będących ich rozszerzeniem układów równań cząstkowych typu reakcja-dyfuzja. Warto również od razu zwrócić uwagę, że w ogólności, do układów tego typu nie stosuje się znana teoria równań różniczkowych w przestrzeniach Banacha. Pewien wkład w rozwój teorii dla układu uwzględniającego dyfuzję jest udziałem autora tego artykułu (por. [6, 44, 28, 29, 30, 31, 22, 24]).

0.1. Sformułowanie układu równań koagulacji-fragmentacji.

Układ koagulacji-fragmentacji z dyfuzją, w wersji dyskretnej, zapisuje się następująco

$$(0.1) \quad \frac{\partial c_i}{\partial t} - d_i \Delta c_i = R_i(c), \quad (x, t) \in \Omega \times (0, +\infty),$$

$$(0.2) \quad \frac{\partial c_i}{\partial \nu} = 0, \quad (x, t) \in \Gamma \times (0, +\infty),$$

$$(0.3) \quad c_i(0, x) = c_i^0(x), \quad x \in \Omega,$$

$$(0.4) \quad R_i(c) = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{i-1} a_{i-j,j} c_{i-j} c_j - \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{i-1} b_{i-j,j} c_i \\ - c_i \sum_{j=1}^{\infty} a_{i,j} c_j + \sum_{j=1}^{\infty} b_{i,j} c_{i+j},$$

dla każdego $i \geq 1$ przy konwencji, że dwa pierwsze składniki w (0.4) nie występują dla $i = 1$. Zbiór $\Omega \subset \mathbb{R}^d$, $d \geq 1$, jest ograniczonym obszarem otwartym z gładkim brzegiem Γ , a ν polem kierunków normalnych zewnętrznych do Γ . Współrzędne ciągu $c = (c_i)_{i \geq 1}$ są funkcjami rzeczywistymi określonymi na zbiorze $\Omega \times (0, +\infty)$ a współczynniki dyfuzji $(d_i)_{i \geq 1}$ tworzą ciąg nieujemnych liczb rzeczywistych. Przyjmujemy także współczynniki

$$(0.5) \quad a_{i,j} = a_{j,i} \geq 0 \quad \text{oraz} \quad b_{i,j} = b_{j,i} \geq 0, \quad i, j \geq 1.$$

Po raz pierwszy układ tego typu (bez operatorów Laplace'a i członów odpowiadających fragmentacji) został sformułowany jako model koagulacji przez wybitnego polskiego fizyka Mariana Smoluchowskiego w 1917 roku¹ [41, 42], stąd też często w literaturze określany jest mianem układu równań Smoluchowskiego. Układ (0.1) bądź jego przypadki szczególne występuje jako model matematyczny w różnych dziedzinach nauki. W astrofizyce był zaproponowany do opisu formowania się gromad galaktyk, w fizykochemii do opisu procesu polimeryzacji [17, 19, 21, 46], w immunologii do opisu procesu aglutynacji oraz w teorii przejść fazowych do opisu powstawania załączków nowej fazy ([5, 45], model Becker'a i Döringa). Literatura fizyczna i matematyczna dotycząca przypadku jednorodnego przestrzennie (tzn. c_i^0 niezależne od x) jest już dość obszerna. Podstawowe rezultaty dotyczące istnienia, jednoznaczności oraz cech jakościowych rozwiązań, w tym asymptotyki czasowej, zostały zawarte w pracach J. M. Ball'a, J. Carr'a, F. P. da Costy, J. B. McLeod'a, a także O. Penrose'a (by wymienić tylko kilka, podajemy [4, 5, 7, 8, 13, 35, 36]).

0.2. Interpretacja fizyczna. Układ (0.1)–(0.4) opisuje ewolucję czasowo-przestrzenną stężeń molekuł (zwanymi dalej klastrami) podlegających procesom łączenia się (koagulacji) lub rozpadu (fragmentacji). Zmienna $c_i = c_i(x, t)$ opisuje stężenie i -klastrów złożonych z i jednakowych elementów podstawowych, zwanych dalej monoklastrami, a więc do opisu wielkości klastra służy tu zmienna dyskretna. Jeśli do opisu klastra stosuje się zmienną ciągłą (np. objętość lub średnicę), przyjmującą wartości rzeczywiste nieujemne, dostaje się tzw. ciągły model koagulacji-fragmentacji, który powstaje formalnie poprzez zastąpienie w (0.4) sum odpowiednimi całkami. Dalej zajmować się będziemy głównie modelem dyskretnym, przegląd rezultatów dotyczących modelu ciągłego można znaleźć w monografii [15]. Po prawej stronie każdego z równań w (0.1) występują człony opisujące tempa procesów agregacji i rozpadu, a po lewej stronie operatory Laplace'a opisujące dyfuzję klastrów zgodną z prawem Fick'a. Proces agregacji, w wyniku którego powstaje $(i+j)$ -klastr, odbywa się według schematu $(i) + (j) \rightarrow (i+j)$ w tempie proporcjonalnym do iloczynu stężeń i -klastrów i j -klastrów ze

¹Ciekawe dane biograficzne o Marianie Smoluchowskim można znaleźć w Delcie 12 (283) 1997.

współczynnikiem tempa reakcji $a_{i,j}$ zależnym od wielkości reagujących klastrów, zwanym dalej współczynnikiem koagulacji. Przyjmuje się, że reakcje wyższych rzędów, w których więcej niż dwa klastry łączą się na raz, występują tak rzadko, że można je pominąć. Zakłada się też, że przy rozpadzie r -klastra powstaje i -klaster oraz j -klaster, $i + j = r$, a tempo tego procesu jest wprost proporcjonalne do stężenia r -klastrów ze współczynnikiem fragmentacji $b_{i,j}$. Można rozważać ogólniejszy przypadek natychmiastowego rozpadu na więcej niż dwie części. Nie zmienia to w znaczący sposób matematycznych własności problemu i tu nie będziemy się tym przypadkiem zajmować. Dodatkowo zakłada się, że temperatura nie zmienia się w trakcie przebiegu rozpatrywanego procesu.

Ważnym założeniem jest przyjęcie, że wielkość powstających klastrów nie jest *a priori* ograniczona z góry, a zatem liczba niewiadomych i równań jest przeliczalnie nieskończona.

Podstawowy wpływ na zachowanie się rozwiązań mają tu założenia dotyczące zachowania się współczynników koagulacji $a_{i,j}$, gdy $i \rightarrow \infty$ lub $j \rightarrow \infty$ oraz ich postaci. W celu umotywowania przyjętych założeń przedstawimy tu podstawowe wzory określające współczynniki $a_{i,j}$ na gruncie teorii polimeryzacji. Rozważmy mianowicie układ złożony z jednakowych molekuł podstawowych (monomerów) takich, że na każdym monomerze znajduje się σ miejsc aktywnych. Wiązanie pomiędzy dwoma molekułami powstaje poprzez połączenie miejsca aktywnego jednej molekuły z miejscem aktywnym na drugiej molekułe.

Przyjmuje się, że współczynniki koagulacji są proporcjonalne do liczby możliwych połączeń pomiędzy miejscami aktywnymi na obu molekułach, oraz że zdolność do łączenia się miejsc aktywnych nie zmienia się w trakcie trwania procesu. Łatwo zauważyć, że w przypadku $\sigma = 1$ w układzie mogą pojawić się co najwyżej 2-mery. Gdy $\sigma = 2$, mogą pojawić się już polimery dowolnej długości. Jeśli nie uwzględnimy możliwości powstawania pętli (sytuacji, w której wolne miejsce aktywne reaguje z innym miejscem aktywnym na tym samym polimerze), to każdy taki polimer ma na swoich końcach dwa miejsca aktywne. W przypadku $\sigma > 2$ sytuacja się komplikuje. Rozpatrzmy dwa przypadki (por. [10, 46]). W pierwszym wszystkie miejsca aktywne są tego samego typu i każde dwa wolne miejsca aktywne mogą zrealizować wiązanie (pętle wykluczone). Prosty rachunek prowadzi do wzoru

$$(0.6) \quad a_{i,j} = \alpha((\sigma - 2)i + 2)((\sigma - 2)j + 2), \quad \alpha > 0,$$

co daje wzrost typu $a_{i,j} = \text{const. } ij$. W drugim przypadku mamy $\sigma - 1$ miejsc aktywnych typu A i jedno typu B na każdym monomerze; co więcej przyłączenie jednej molekuły do drugiej może być zrealizowane tylko wtedy, gdy miejsce typu A spotka się z miejscem typu B. Otrzymujemy wtedy

$$(0.7) \quad a_{i,j} = \alpha(((\sigma - 2)i + 1) + ((\sigma - 2)j + 1)), \quad \alpha > 0,$$

co daje wzrost typu $a_{i,j} = \text{const. } (i + j)$.

Uwzględnienie wpływu występowania wiązań wewnętrznych (pętli), które zmniejszają liczbę wolnych miejsc aktywnych, prowadzi do następujących wzorów

$$(0.8) \quad a_{i,j} = s_i s_j \quad \text{lub} \quad a_{i,j} = s_i + s_j, \quad \text{gdzie } s_i = i^\omega.$$

Jeśli liczba wolnych miejsc na cząsteczce polimerowej jest zredukowana na skutek wiązań wewnętrznych, to $\omega \in (0, 1)$ (por. [21]). Zwróćmy uwagę, że jeśli $\omega \in (0, 1)$, to współczynniki koagulacji spełniają warunek

$$(0.9) \quad \lim_{j \rightarrow +\infty} \frac{a_{i,j}}{j} = 0 \quad \text{dla każdego } i \geq 1.$$

Dla przykładu podajemy niżej wzór określający współczynniki fragmentacji

$$b_{i,j} = \beta_0 (i + j)^\beta, \quad \beta \in \mathbb{R}.$$

Gdy $\beta > 0$, tendencja do rozpadu klastra wzrasta wraz z jego wielkością, a dla $\beta < 0$, odwrotnie.

Ważną podklasę układu koagulacji-fragmentacji stanowi wspomniany już model Becker'a i Döringa, który opisuje warunki, w których oddziaływanie między klastrami ogranicza się do przyłączenia lub odłączenia jedynie monoklastra, a pozostałe możliwe połączenia uznaje się za mało prawdopodobne. Model taki pojawia się w teorii nukleacji (patrz np. [5, 45]). Można go otrzymać z (0.1)–(0.4) kładąc

$$(0.10) \quad \begin{aligned} a_{1,i} &= a_i, & b_{1,i} &= b_{i+1} & \text{dla } i \geq 2, \\ a_{1,1} &= 2a_1, & b_{1,1} &= 2b_2, \\ a_{i,j} &= b_{i,j} = 0 & \text{jeśli } \min\{i, j\} \geq 2. \end{aligned}$$

W tym artykule nie będziemy omawiać tego modelu. Podstawowe rezultaty dotyczące istnienia, jednoznaczności rozwiązań, ich regularności, a także asymptotyki czasowej w przypadku nie uwzględniającym dyfuzji, można znaleźć w pracach [5, 40, 9], a w przypadku z dyfuzją w artykułach [29, 30].

Zwróćmy uwagę, że procesy koagulacji i rozpadu zmieniają dystrybucję populacji monoklastrów pomiędzy poszczególnymi klasami klastrów (i -ta klasa składa się z i -klastrów). W układzie tym nie uwzględnia się zewnętrznego źródła cząstek, a warunki brzegowe odpowiadają izolacji brzegu. W związku z tym oczekiwać można, że całkowita masa monoklastrów zawartych we wszystkich klastrach powinna być zachowana, tzn.

$$(0.11) \quad \sum_{i=1}^{\infty} i \int_{\Omega} c_i(t, x) dx = \sum_{i=1}^{\infty} i \int_{\Omega} c_i^0(x) dx, \quad t \in [0, +\infty).$$

Jeśli jednak zechcemy sprawdzić, czy powyższa równość rzeczywiście zachodzi dla rozwiązania $c = (c_i)_{i \geq 1}$ układu (0.1)–(0.4), to otrzymamy dla $k \geq 2$

$$(0.12) \quad \sum_{i=1}^k \int_{\Omega} i c_i(t, x) dx - \sum_{i=1}^k \int_{\Omega} i c_i^0(x) dx \\ = - \sum_{i=1}^k \sum_{j=k+1-i}^{\infty} \int_0^t \int_{\Omega} i (a_{i,j} c_i c_j - b_{i,j} c_{i+j})(s, x) dx ds,$$

gdzie wykorzystano własność warunku brzegowego (0.2). Zatem (0.11) będzie spełnione pod warunkiem, że wyrażenie po prawej stronie (0.12) zbiega do zera, gdy $k \rightarrow +\infty$. Okazuje się, że nie zawsze tak jest, nawet w przypadkach istotnych z fizycznego punktu widzenia. Jest to niewątpliwie jedna z najciekawszych własności tego równania i poświęcimy jej więcej miejsca w rozdziale trzecim tego artykułu. Efekt załamania się prawa zachowania masy w trakcie ewolucji czasowej rozwiązania jest w literaturze fizycznej znany jako model przemiany zol-żel lub inaczej żelacji.

0.3. Definicja rozwiązania. Wprowadzimy teraz przestrzeń funkcyjną pojawiającą się w naturalny sposób w trakcie analizy układu. W świetle (0.11) spodziewamy się, że rozwiązanie (0.1)–(0.4) w każdej chwili czasu należeć będzie do przestrzeni Banacha \mathcal{X} określonej następująco

$$(0.13) \quad \mathcal{X} = \left\{ c = (c_i)_{i \geq 1}, c_i \in L^1(\Omega), \sum_{i=1}^{\infty} i |c_i|_{L^1} < \infty \right\},$$

z normą

$$\|c\|_{\mathcal{X}} = \sum_{i=1}^{\infty} i |c_i|_{L^1}, \quad c \in \mathcal{X}.$$

Począwszy od teraz L^1 -norma funkcji u całkownej w sensie Lebesgue'a na zbiorze Ω będzie oznaczana przez $|u|_{L^1}$, tzn.

$$|u|_{L^1} = \int_{\Omega} |u(x)| dx.$$

Wprowadzamy również stożek dodatni $\mathcal{X}^+ \subset \mathcal{X}$ określony przez

$$(0.14) \quad \mathcal{X}^+ = \{c = (c_i)_{i \geq 1} \in \mathcal{X}, c_i \geq 0 \text{ p.w. w } \Omega, i \geq 1\}.$$

W przypadku układu równań zwyczajnych otrzymanego przez usunięcie operatorów Laplace'a naturalną przestrzenią jest oczywiście przestrzeń Banacha

$$(0.15) \quad l_{1,1} = \left\{ c = (c_i)_{i \geq 1}, c_i \in \mathbb{R}, \sum_{i=1}^{\infty} i |c_i| < \infty \right\},$$

z normą

$$\|c\|_{1,1} = \sum_{i=1}^{\infty} i |c_i|, \quad c \in l_{1,1}.$$

Podobnie do poprzedniego przypadku, przez $l_{1,1}^+$ oznaczamy stożek dodatni w $l_{1,1}$.

Okazuje się, że do omawianego układu równań zwyczajnych nie stosuje się znana teoria równań różniczkowych w przestrzeni Banacha. W paragrafie 1.1 podamy przykład ilustrujący, że prawe strony układu równań w ogólności nie są dobrze określone w przestrzeni $l_{1,1}$. Przy takim wyborze przestrzeni definicja rozwiązania układu (0.1)–(0.4) brzmi następująco.

DEFINICJA 0.1. Niech $T_* \in (0, +\infty]$. *Rozwiązaniem* $c = (c_i)_{i \geq 1}$ układu (0.1)–(0.3) na odcinku $[0, T_*)$ nazywamy przekształcenie z odcinka $[0, T_*)$ o wartościach w \mathcal{X}^+ takie, że dla każdego $T \in (0, T_*)$ oraz $i \geq 1$ zachodzi:

1. $c_i \in \mathcal{C}([0, T]; L^1(\Omega))$,
2. $\sum_{j=1}^{\infty} a_{i,j} c_j \in L^1((0, T) \times \Omega)$, $\sum_{j=1}^{\infty} b_{i,j} c_{i+j} \in L^1((0, T) \times \Omega)$,
3. funkcja c_i jest rozwiązaniem całkowym i -tego równania w (0.1), to znaczy c_i spełnia dla każdego $t \in [0, T]$,

$$(0.16) \quad c_i(t) = e^{d_i L_1 t} c_i^0 + \int_0^t e^{d_i L_1 (t-s)} R_i(c(s)) ds,$$

gdzie R_i jest zdefiniowane przez (0.4), L_1 oznacza domknięcie w $L^1(\Omega)$ nieograniczonego operatora liniowego L określonego w $L^2(\Omega)$ i zdefiniowanego jako

$$D(L) = \left\{ w \in H^2(\Omega), \frac{\partial w}{\partial \nu} = 0 \text{ na } \partial\Omega \right\}, \quad Lw = \Delta w,$$

gdzie $e^{d_i L_1 t}$ jest C_0 -półgrupą generowaną przez $d_i L_1$ w $L^1(\Omega)$.

Odsyłamy do pracy [2] zawierającej rezultaty o generowaniu półgrupy przez operator eliptyczny w przestrzeni $L^1(\Omega)$.

Zauważmy, że drugi punkt Definicji 0.1 gwarantuje, że $R_i(c) \in L^1((0, T) \times \Omega)$, a zatem sformułowanie całkowite (0.16) ma sens. Warto podkreślić, że całkowalność członów kwadratowych w $R_i(c)$ na $(0, T) \times \Omega$ nie wynika z faktu, że $c \in \mathcal{X}$ przy fizycznie uzasadnionych założeniach (por. (0.6))

$$(0.17) \quad a_{i,j} \leq Aij, \quad i, j \geq 1, \quad A > 0.$$

Z tym faktem związana jest główna trudność przy badaniu istnienia rozwiązań układu (0.1)–(0.3) z dyfuzją. W przypadku układu równań zwyczajnych ta trudność znika. Jeśli bowiem $c = (c_i)_{i \geq 1} \in l_{1,1}^+$, a współczynniki koagulacji $(a_{i,j})$ spełniają (0.17), to wtedy

$$\sum_{j=1}^{\infty} a_{i,j} c_j \leq A \|c\|_{1,1}^2, \quad i \geq 1.$$

Zbliżona definicja rozwiązania została wprowadzona w [4] w przypadku układu równań zwyczajnych odpowiadającemu (0.1)–(0.4).

0.4. Istnienie rozwiązań – przegląd metod. Przedstawimy teraz skrótowo metody, które były stosowane przy badaniu istnienia rozwiązań układu (0.1)–(0.4).

Najczęściej stosowaną w literaturze metodą jest aproksymacja rozwiązania układu (0.1)–(0.4) rozwiązaniami układów skończenia wielu, powiedzmy N , równań typu reakcja-dyfuzja otrzymanych z (0.1)–(0.4) przez pewnego rodzaju ucięcie. Istnienie i jednoznaczność rozwiązania dla układu uciętego wynika z dobrze znanej teorii [38, 34]. Wtedy rozwiązanie układu (0.1)–(0.3) otrzymuje się przechodząc do granicy z $N \rightarrow +\infty$. Żeby zilustrować to podejście rozważmy dla $N \geq 2$ następujący układ N równań:

$$(0.18) \quad \frac{\partial c_i^{(N)}}{\partial t} - d_i \Delta c_i^{(N)} = R_i^{(N)}(c^{(N)}), \quad (t, x) \in (0, +\infty) \times \Omega,$$

gdzie $i \in \{1, \dots, N\}$, $c^{(N)} = (c_i^{(N)})_{1 \leq i \leq N}$ z warunkiem brzegowym i początkowym tak jak w (0.2)–(0.3) oraz $R_i^{(N)}(c^{(N)})$ danym przez

$$(0.19) \quad R_i^{(N)}(c^{(N)}) = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{i-1} a_{i-j,j} c_{i-j}^{(N)} c_j^{(N)} - \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{i-1} b_{i-j,j} c_i^{(N)} \\ - c_i^{(N)} \sum_{j=1}^{N-i} a_{i,j} c_j^{(N)} + \sum_{j=1}^{N-i} b_{i,j} c_{i+j}^{(N)},$$

przy czym pierwsze dwa składniki w (0.19) są równe zero, gdy $i = 1$. Zauważmy, że układ (0.18) otrzymuje się z (0.1)–(0.4) kładąc $a_{i,j} = b_{i,j} = 0$ dla $i > N$ lub $j > N$. Takie ucięcie było zastosowane w przypadku układu równań zwyczajnych, np. w pracach [4, 33] oraz w [11] dla układu z dyfuzją przy dodatkowym założeniu $d_i = D > 0$ dla $i \geq 1$. Warto podkreślić, że rozwiązanie (0.18), $c^{(N)} = (c_i^{(N)})_{1 \leq i \leq N}$ spełnia uciętą wersję prawa zachowania masy (por. (0.11))

$$(0.20) \quad \sum_{i=1}^N i \int_{\Omega} c_i^{(N)}(t, x) dx = \sum_{i=1}^N i \int_{\Omega} c_i^0(x) dx, \quad t \geq 0.$$

Podstawowym narzędziem umożliwiającym przejście do granicy, gdy $N \rightarrow \infty$ (po przejściu do podciągu), jest zwartość półgrupy generowanej przez operator Laplace'a w $L^1(\Omega)$ oraz oszacowanie jednostajne względem N członów

$$c_i^{(N)} \sum_{j=N_0}^{N-i} a_{i,j} c_j^{(N)} \quad \text{oraz} \quad \sum_{j=N_0}^{N-i} b_{i,j} c_{i+j}^{(N)}$$

dla dowolnego ustalonego $i \geq 1$. Po wybraniu podciągu metodą przekątniową dostaje się ciąg zbieżny do pewnej funkcji $c = (c)_{i \geq 1} \in \mathcal{X}$. Pozostaje pokazać, że jest ona rozwiązaniem w sensie Definicji 0.1. W tym celu

trzeba pokazać, że $R_i^{(N)}(c^{(N)})$ zbiega do $R_i(c)$. Ciągłość rozwiązań całkowitych względem danych gwarantuje, że po przejściu do granicy element $c \in \mathcal{X}$ spełnia punkt 3 z Definicji 0.1 czyli formułę uzmiennienia stałej. Zwykle jest dość łatwo otrzymać oszacowanie członu

$$\sum_{j=1}^{N-i} a_{i,j} c_j^{(N)}$$

w przestrzeni $L^1((0, T) \times \Omega)$ i wtedy pozostaje znaleźć oszacowanie dla każdego $c_i^{(N)}$ w przestrzeni $L^\infty(\Omega \times (0, \infty))$ niezależne od N . Ten wymóg prowadzi zwykle do przyjęcia pewnych dodatkowych założeń o współczynnikach $(a_{i,j})$ i $(b_{i,j})$ lub współczynnikach dyfuzji (d_i) . Tego typu dodatkowe ograniczenia nie występują w przypadku układu równań zwyczajnych. Innego typu aproksymacje układu nieskończonego (0.1)–(0.4) układami skończonymi były wykorzystane w pracach [14, 15, 25, 44]. Warto podkreślić, że naszkicowana wyżej metoda ucięcia daje w efekcie rozwiązania globalne w czasie.

Inne podejście do problemu istnienia rozwiązań, stosowane skutecznie od lat do układów skończenie wielu równań typu reakcja-dyfuzja, polega na ujęciu zagadnienia (0.1)–(0.4) jako równania różniczkowego w odpowiedniej przestrzeni Banacha Y . Mamy wtedy

$$\frac{dc}{dt} + \mathcal{A}c = \mathcal{F}(c), \quad \text{w } Y,$$

gdzie \mathcal{A} jest operatorem liniowym określonym przez $\mathcal{A}c = (-d_i \Delta c_i)_{i \geq 1}$ z warunkiem brzegowym typu Neumanna, a $\mathcal{F}(c) = (R_i(c))_{i \geq 1}$. To podejście zostało zastosowane w pracy [20] w przypadku jednorodnym przestrzennie oraz w pracach [3, 20] w przypadku ogólnym. Główny problem polega tu na znalezieniu takiej przestrzeni funkcyjnej Y , w której z jednej strony \mathcal{A} jest liniowym operatorem nieograniczonym o dobrych własnościach, a z drugiej nieliniowy człon \mathcal{F} jest przekształceniem spełniającym lokalnie warunek Lipschitza. Te dwie własności umożliwiają zastosowanie twierdzenia o kontrakcji Banacha i otrzymanie jednoznacznego rozwiązania określonego lokalnie w czasie.

Podkreślimy, że wybór przestrzeni Y nie jest *a priori* oczywisty, w szczególności nie pasuje tu przestrzeń \mathcal{X} , gdyż \mathcal{F} nie jest nawet dobrze określone na \mathcal{X} . Nawet w przypadku układu równań zwyczajnych \mathcal{F} spełnia lokalnie warunek Lipschitza w $l_{1,1}$, jeśli tylko istnieją stałe A i B takie, że

$$(0.21) \quad a_{i,j} \leq A \quad \text{oraz} \quad \sum_{j=1}^{i-1} b_{i-j,j} \leq B \quad \text{dla } i, j \geq 1.$$

Założenie to w zestawieniu z (0.6)–(0.8) wyklucza jednak szeroką klasę przypadków istotnych z fizycznego punktu widzenia. Jednakże warunek ograni-

czoności współczynników koagulacji jest spełniony w sytuacji, w której monomery mają tylko dwa miejsca aktywne, bo wtedy reaktywność cząsteczek polimerów nie zależy od ich wielkości (por. rozważania w paragrafie 0.2).

Warto w tym miejscu zwrócić uwagę na pracę [3], w której przyjęto bardzo abstrakcyjny punkt widzenia rozpatrując przestrzeń dystrybucji określonych na $\Omega = \mathbb{R}^d$ o wartościach w przestrzeni Banacha $l_{1,1}$. Podprzestrzeniami tejsze są uogólnione przestrzenie Sobolewa lub Slobodeckiego. Okazuje się, że wiele rezultatów, np. twierdzenia o włożeniach bądź o generowaniu podgrup, można przenieść na przypadek tych uogólnionych przestrzeni i rozpatrywać w miejsce przestrzeni Y uogólnioną przestrzeń Slobodeckiego o takich parametrach, że elementy tej przestrzeni są funkcjami ciągłymi na Ω o wartościach w $l_{1,1}$; wtedy oczywiście, przy założeniu (0.21), \mathcal{F} spełnia lokalnie warunek Lipschitza w Y . To podejście prowadzi do dalszego ograniczenia na współczynniki dyfuzji, $d_i \geq d_0 > 0$, gwarantującego jednostajną eliptyczność operatora \mathcal{A} . Korzyścią tego abstrakcyjnego ujęcia jest możliwość jednolitego potraktowania dyskretnych i ciągłych modeli koagulacji z dyfuzją. Przedłużenie lokalnego w czasie rozwiązania dla wszystkich $t > 0$ wykazano do tej pory jedynie w [3] w przypadku jednego wymiaru przestrzennego.

Ostatnio pojawiły się prace, w których rozwiązania układu (0.1)–(0.3) otrzymuje się metodami probabilistycznymi przybliżając je za pomocą odpowiednich procesów Markowa (patrz [1, 16, 20, 23, 37] w przypadku równania zwyczajnego oraz [20] w przypadku z dyfuzją).

U w a g a. Warto zwrócić uwagę, że zamiast operatorów Laplace’a można rozważyć ogólny jednostajnie eliptyczny operator w każdym równaniu układu. Ważne jest jedynie, aby generował on mocno ciągłą i zwartą półgrupę operatorów, zachowującą stożek dodatni w odpowiedniej przestrzeni. Uogólnienie takie niewątpliwie poszerza zakres efektów fizycznych wziętych pod uwagę w modelu o konwekcję, ruch w polu zewnętrznym czy też pochłanianie. Nie powoduje ono jednak, prócz komplikacji technicznych, nowych jakościowo trudności matematycznych i dlatego ograniczamy się do uwzględnienia najprostszego operatora eliptycznego. Można również rozważyć, w ramach wspomnianych wyżej metod, inne niż (0.2) warunki brzegowe opisujące różne procesy fizyczne zachodzące na brzegu obszaru. Tu przyjęto po prostu, że obszar Ω jest idealnie izolowany i żadna materia nie przedostaje się przez jego brzeg.

1. Istnienie rozwiązań układu (0.1)–(0.4) i ich podstawowe własności. Rozpocniemy od podania podstawowych rezultatów dotyczących układu równań zwyczajnych, który otrzymuje się z (0.1)–(0.4) poprzez usunięcie ze wszystkich równań operatorów Laplace’a oraz zaniechanie zmiennej przestrzennej. Innymi słowy, chodzi tu o model jednorodny przestrzennie.

1.1. Układ koagulacji-fragmentacji bez dyfuzji. Rozpocznijmy od podania przykładu ilustrującego fakt, że operator nieliniowy $\mathcal{F} : l_{1,1} \rightarrow l_{1,1}$ nie jest dobrze określony jeśli współczynniki koagulacji są nieograniczone.

TWIERDZENIE 1.1. *W układzie (0.1)–(0.4), w przypadku układu równań zwyczajnych, weźmy $a_{i,j} = i^\alpha j^\alpha$ oraz $b_{i,j} = 0$ dla $i, j \geq 1$. Wtedy odwzorowanie $\mathcal{F} : l_{1,1} \rightarrow l_{1,1}$ nie jest dobrze określone, jeśli $\alpha > 0$. Jeśli natomiast istnieje A takie, że $a_{i,j} \leq A$ dla wszystkich $i, j \geq 1$, to odwzorowanie \mathcal{F} spełnia lokalnie warunek Lipschitza.*

D o w ó d. Ustalmy $\alpha > 0$ i połóżmy $(v)_{i \geq 1}$ takie, że

$$v_i = \begin{cases} 3^{-\beta k} & \text{gdy } i = 3^k, \\ 0 & \text{gdy } i \neq 3^k, \end{cases}$$

dla $k = 1, 2, 3, \dots$ oraz $\beta > 1$. Oczywiście $\sum_{i=1}^{\infty} i v_i < \infty$, a więc $v \in l_{1,1}$. Okazuje się jednak, że $\mathcal{F}(v)$ nie należy do $l_{1,1}$. Istotnie,

$$\sum_{i=1}^{\infty} i |R_i(v)| = \frac{1}{2} \sum_{\mathbb{N}-I} \sum_{j=1}^{i-1} i(i-j)^\alpha j^\alpha v_{i-j} v_j + \sum_I i^{1+\alpha} v_i \sum_{j=1}^{\infty} j v_j$$

gdzie $I = \{i \in \mathbb{N} : i = 3^k, k = 1, 2, \dots\}$. Takie rozbitcie przedziałów sumowania wynika stąd, że w i -tym równaniu dla $i = 3^k$ człon $\frac{1}{2} \sum_I \sum_{j=1}^{i-1} i(i-j)^\alpha \times j^\alpha v_{i-j} v_j$ jest równy zero, ponieważ liczba postaci 3^k , $k = 1, 2, \dots$ nie może być przedstawiona jako suma dwóch liczb tej samej postaci, tzn. nie istnieją liczby l, s takie, że $3^k = 3^l + 3^s$, gdzie $l, s < k$. Zatem

$$\sum_{i=1}^{\infty} i |R_i(v)| > \sum_I i^{1+\alpha} v_i \sum_{j=1}^{\infty} j v_j = \sum_{k=1}^{\infty} 3^{(1+\alpha-\beta)k} \sum_{j=1}^{\infty} 3^{(\alpha-\beta)j}$$

Stąd widać, że jeśli $\beta \in (1, 1 + \alpha)$, to szereg $\sum_{i=1}^{\infty} i |R_i(v)|$ jest rozbieżny do nieskończoności.

Przechodząc do drugiej części stwierdzenia łatwo sprawdzić, że dla dowolnych $c \in l_{1,1}$ i $w \in l_{1,1}$ otrzymujemy

$$\|\mathcal{F}(c) - \mathcal{F}(w)\|_{1,1} \leq 2A^2 (\|c\|_{1,1} + \|w\|_{1,1}) \sum_{i=1}^{\infty} i |c_i - w_i|.$$

Przedstawimy teraz zawarty w [4] przykład ilustrujący niejednoznaczność rozwiązań w przypadku układu uwzględniającego jedynie fragmentację klastrów. Rozważmy mianowicie (0.1)–(0.4) z $a_{i,j} = 0$ i $d_i = 0$ oraz $b_{i,j} = 1$ dla $i, j \geq 1$. Otrzymujemy wtedy

$$\frac{dc_i}{dt} = -\frac{1}{2}(j-1)c_i + \sum_{j=i+1}^{\infty} c_j \quad i = 1, 2, \dots$$

Można sprawdzić, że funkcje $\tilde{c}_i = (e^{-t/2})^{i-1}(1 - e^{-t/2})^2$, $i = 1, 2, \dots$, spełniają powyższe równanie, oraz że $\tilde{c}_i(0) = 0$. Nietrudno wyliczyć w oparciu o elementarną wiedzę o szeregach potęgowych, że $\sum_{i=1}^{\infty} i\tilde{c}_i = 1$ dla wszystkich $t > 0$. Jednocześnie rozwiązaniem tego równania z zerowymi warunkami początkowymi jest oczywiście rozwiązanie zerowe. Przykład pokazuje zatem istnienie rozwiązania nie mającego fizycznej interpretacji.

W tym przypadku również, mimo że \mathcal{F} jest operatorem liniowym, dziedziną jego nie jest cały zbiór $l_{1,1}^+$ i przypadek ten nie podpada pod standardową teorię równań różniczkowych z prawymi stronami spełniającymi lokalny warunek Lipschitza.

Wspomnijmy tu jeszcze pracę [28], w której udowodniono, że w klasie rozwiązań zachowujących masę początkową, rozwiązanie układu fragmentacji może być tylko jedno. Co więcej, w wyniku naturalnej aproksymacji rozwiązania otrzymuje się jedyne rozwiązanie zachowujące masę początkową bez założeń na wzrost współczynników fragmentacji. Jest to prawdą również dla modelu z dyfuzją i współczynników $b_{i,j}$ zależnych od zmiennej c_{i+j} w sposób monotoniczny. Szczegóły można znaleźć w [28].

Od czasu pionierskich prac [35, 36] istnienie rozwiązań dla układu koagulacji-fragmentacji (bez dyfuzji) było badane przez różnych autorów. Przyjmując, że $c^0 = (c_i^0)_{i \geq 1}$ należy do $l_{1,1}^+$, istnienie rozwiązania udowodniono w [33] przy założeniach

$$a_{i,j} \leq r_i r_j \quad \text{i} \quad \lim_{i \rightarrow +\infty} \frac{r_i}{i} = 0 \quad \text{oraz} \quad b_{i,j} = 0.$$

We wspomnianej już pracy Ball'a i Carr'a [4] wykazano istnienie rozwiązania przyjmując

$$(1.1) \quad a_{i,j} \leq A(i+j), \quad A \geq 0,$$

bez żadnych założeń o wzroście współczynników fragmentacji $b_{i,j}$, co jest godne podkreślenia, gdyż ich ograniczoność nie wynika z przynależności niewiadomej do przestrzeni $l_{1,1}^+$. Dodajmy, że rozwiązanie zachowuje masę początkową dla wszystkich $t > 0$. Dowód tego rezultatu oparty jest na pewnych bardzo niebanalnych obserwacjach dotyczących jednostajnych oszacowań reszt szeregów występujących w równaniach. Niestety, nie daje się on przenieść na przypadek z dyfuzją bez poczynienia drastycznego założenia o współczynnikach dyfuzji, mianowicie $d_i = D$ dla wszystkich $i \geq 1$.

Zgodnie z naszą wiedzą, do tej pory nie ma rezultatów dotyczących istnienia rozwiązań dla układu koagulacji-fragmentacji, gdy współczynniki koagulacji spełniają (0.17) ale nie (1.1). Znane są jednakże dwa wyniki częściowe. W pracy [13] wykazano istnienie rozwiązania z warunkiem początkowym $c^0 \in l_{1,1}^+$ przy następujących założeniach: istnieją $\alpha \in (1/2, 1]$ i $\gamma \in (\alpha, +\infty)$ takie, że

$$a_{i,j} \leq A(ij)^\alpha, \quad i, j \geq 1, \quad A \geq 0,$$

oraz dla każdego $\mu \geq 1$ istnieje $B_\mu > 0$ takie, że

$$\sum_{j=1}^{[(1/2)(i-1)]} j^\mu b_{j,i-j} \geq B_\mu i^{\mu+\gamma}, \quad i \geq 1.$$

Przyjęcie $\gamma > \alpha$ okazuje się zapewniać istnienie rozwiązania globalnego w czasie, którego masa jest równa masie początkowej dla wszystkich $t > 0$. W tym przypadku ewolucja jest w pewnym sensie zdominowana przez proces fragmentacji, co usprawiedliwia przyjęcie określenia „silna fragmentacja” w tym przypadku. Jest ona tak silna, że przeciwdziała wspomnianej we wstępie żelacji.

Drugi rezultat (patrz [25]) dotyczy współczynników koagulacji typu moltiplikatywnego, mianowicie

$$a_{i,j} = r_i r_j + \alpha_{i,j}, \quad i, j \geq 1,$$

oraz $\alpha_{i,j} \leq A r_i r_j$, $i, j \geq 1$ dla pewnego $A > 0$ przy $b_{i,j} = 0$. Może być on jednak rozszerzony na przypadek niezerowej fragmentacji, o ile jest ona dostatecznie „słaba” w porównaniu z koagulacją. Warto tu podkreślić, że przy powyższych założeniach masa określona przez $\sum_{i=1}^{\infty} i c_i$ nie jest zachowana dla wszystkich $t > 0$ i od pewnego momentu maleje.

Problem jednoznaczności rozwiązań jest w ogólności otwarty, a częściowe rezultaty można znaleźć w pracach [4, 13, 23, 25, 37].

Ostatnio zauważono w [26], że metoda przybliżania rozwiązania rozwiązaniami układów uciętych ma pewne osobliwości. Mianowicie w pracy [5] udowodniono, że przy pewnych prostych, ale nie mających widocznego fizycznego uzasadnienia, założeniach na współczynniki koagulacji nie istnieje rozwiązanie układu nawet lokalnie w czasie. W pracy [26] udowodniono jednak, że rozwiązania układów uciętych zbiegają do pewnej granicy.

1.2. Układ koagulacji-fragmentacji z dyfuzją. We wstępie wspomniano już, że główną metodą pozwalającą wykazać istnienie rozwiązania w przypadku nieograniczonych współczynników koagulacji i fragmentacji jest aproksymacja za pomocą ciągu rozwiązań układów uciętych w połączeniu z metodą zwartości.

Zwróćmy uwagę, że punkt drugi Definicji 0.1 wymaga, by $c_i \sum_{j=1}^{\infty} a_{i,j} c_j \in L^1(\Omega \times (0, T))$ dla każdego $i \geq 1$. Stosunkowo łatwo pokazać, że $\sum_{j=1}^{\infty} a_{i,j} c_j \in L^1(\Omega \times (0, T))$ i pozostaje wtedy znaleźć oszacowanie w przestrzeni $L^\infty(\Omega \times (0, T))$ dla każdego c_i , $i = 1, 2, \dots$. Ten wymóg odróżnia znacząco przypadek układu równań cząstkowych od przypadku, odpowiadającego mu, układu równań zwyczajnych omawianego w poprzednim paragrafie.

W pracy [44] przyjmuje się ucięcie (P^N) układu wyjściowego określone przez wstawienie w (0.1)–(0.4)

$$(1.2) \quad a_{ij} = 0 \quad \text{dla } i > N \text{ lub } j > N \quad \text{oraz} \quad b_{ij} = 0 \quad \text{dla } i + j > N.$$

Układ ucięty (\mathbf{P}^N) odpowiada pierwszym $2N$ równaniom układu (0.1) i różni się od układu zdefiniowanego w (0.19). Zastosowanie znanej teorii (np. [38, 34] daje prawie natychmiast istnienie i jednoznaczność nieujemnego rozwiązania tego układu (patrz Stwierdzenie 2.1 w [44]). Mnożąc i -te równanie w (\mathbf{P}^N) przez liczbę g_i i sumując równania otrzymujemy następujące równanie

$$(1.3) \quad \sum_{i=1}^{2N} g_i \frac{\partial c_i^N}{\partial t} - \sum_{i=1}^{2N} g_i d_i \Delta c_i^N \\ = \frac{1}{2} \sum_{1 \leq i, j \leq N} (g_{i+j} - g_i - g_j) a_{ij} c_i^N c_j^N \\ - \frac{1}{2} \sum_{1 < i+j \leq N} (g_{i+j} - g_i - g_j) b_{ij} c_{i+j}^N \quad \text{w } \Omega \times (0, T_{\max}).$$

Kładąc teraz $g_i = i$ dla $i = 1, \dots, 2N$ i całkując po $\Omega \times (0, t)$, otrzymujemy dla $0 \leq t < T_{\max}$ formułę zachowania masy dla rozwiązania $(c^N)_{1 \leq i \leq 2N}$

$$(1.4) \quad \sum_{i=1}^{2N} \int_{\Omega} i c_i^N(x, t) dx = \sum_{i=1}^{2N} \int_{\Omega} i c_i^0(x) dx.$$

Następujące twierdzenie (por. Twierdzenie 3.1 w [44]) dowodzi istnienia globalnego w czasie rozwiązania w przypadku dowolnych dodatnich współczynników dyfuzji.

Twierdzenie 1.2. *Przypuśćmy, że dla $i \geq 1$, $d_i > 0$, $c^0 \in \mathcal{X}^+$, $c_i^0 \in L^\infty(\Omega)$ oraz*

(1.5) *dla każdego $i \geq 1$ istnieje $\gamma_i > 0$ taka, że $b_{ij-i} \leq \gamma_i a_{ij}$ dla $j \geq i+1$,*

(1.6) *dla każdego $i \geq 1$ $a_{ij} = o(j)$.*

Wtedy dla $T > 0$ istnieje rozwiązanie układu (0.1)–(0.4), $(c_i)_{i \geq 1}$, określone na $\Omega \times (0, +\infty)$ takie, że dla $i = 1, 2, \dots$

$$(1.7) \quad \|c_i\|_{L^\infty(\Omega \times (0, \infty))} \leq K_i$$

gdzie

$$K_i = k_i + 1 + \frac{\sum_{j=1}^{i-1} a_{i-jj} K_{i-j} K_j}{\sum_{j=1}^{i-1} b_{i-j,j} + a_{i,i}}, \quad k_i = \max\{\gamma_i, \|c_i^0\|_{L^\infty(\Omega)}\},$$

$$(1.8) \quad \sum_{j=1}^{\infty} a_{ij} c_j, \quad \sum_{j=i+1}^{\infty} b_{i,j-i} c_j \in L^\infty(0, T; L^1(\Omega)) \quad \text{dla każdego } T > 0$$

oraz

$$\int_{\Omega} \sum_{i=1}^{\infty} i c_i(x, t) dx \leq \int_{\Omega} \sum_{i=1}^{\infty} i c_i^0(x) dx \quad \text{dla } t \in [0, T].$$

Założenie (1.5) w połączeniu z definicją układu uciętego, nieco inną niż wspomniana we wstępie, umożliwiającą znalezienie L^∞ -oszacowań dla każdej składowej $(c^N)_{1 \leq i \leq 2N}$ jednostajnie względem N . Zauważmy, że to założenie nie wyklucza nieograniczonych współczynników koagulacji i fragmentacji, np. $a_{i,j} = Ai^\omega j^\omega$ i $b_{i,j} = B(i+j)^\omega$ dla $0 < \omega < 1$, gdzie A, B są dowolnymi stałymi dodatnimi.

Przy dodatkowych założeniach o współczynnikach dyfuzji i danych początkowych udowodniono w [44] istnienie rozwiązań zachowujących masę początkową przy ogólniejszych założeniach na współczynniki koagulacji.

TWIERDZENIE 1.3. *Przypuśćmy, że $d_i > 0$ dla $i \geq 1$ oraz:*

(i) *istnieją liczby i_0 i $D > 0$ takie, że*

$$(1.10) \quad d_i = D \quad \text{dla } i \geq i_0,$$

(ii) *dla wszystkich $i \geq 1$, jeśli $1 \leq i < i_0$ to istnieje $\gamma_i > 0$ taka, że*

$$(1.11) \quad b_{i,j-i} \leq \gamma_i a_{i,j} \quad \text{dla } j \geq i+1,$$

oraz

$$b_{ij} = o(j^2) \quad \text{dla każdego } i \geq i_0,$$

(iii) *drugi moment ciągu danych początkowych jest istotnie ograniczony*

$$(1.12) \quad \sum_{i=1}^{\infty} i^2 \|c_i^0\|_{L^\infty(\Omega)} \leq \text{const.}$$

Co więcej, załóżmy, że współczynniki koagulacji spełniają albo warunek

$$(1.13) \quad a_{i,j} \leq A(i+j),$$

albo

$$(1.14) \quad a_{i,j} \leq Aij.$$

Istnieje wtedy $T > 0$ takie, że nieujemne rozwiązanie $(c_i)_{i \geq 1}$ jest określone na $\Omega \times (0, T)$ oraz dla $i = 1, 2, \dots$

$$(1.15) \quad c_i \in L^\infty(\Omega_T) \cap W_{\text{loc}}^{1,2}([0, T]; L^2(\Omega)) \cap c_i \in L_{\text{loc}}^2([0, T]; D(L)),$$

$$(1.16) \quad \sum_{j=1}^{\infty} a_{ij} c_j, \quad \sum_{j=i+1}^{\infty} b_{ij-i} c_j \in L^\infty(\Omega_T).$$

Każde równanie w (0.1) jest spełnione prawie wszędzie w $\Omega \times (0, T)$ oraz

$$(1.17) \quad \sum_{k=1}^{\infty} \int_{\Omega} kc_k(x, t) dx = \sum_{k=1}^{\infty} \int_{\Omega} kc_k^0(x) dx \quad \text{dla } t \in [0, T].$$

Przy założeniu (1.13) rozwiązanie jest określone w $\Omega \times (0, \infty)$ i (1.17) zachodzi dla dowolnego $T > 0$.

Dowód tego twierdzenia w sposób istotny wykorzystuje zasadę maksimum dla równań parabolicznych zastosowaną do skalarnego równania parabolicznego otrzymanego w wyniku zsumowania równań układu poczynając od i_0 . W konsekwencji otrzymuje się odpowiednie oszacowanie dla reszt szeregów występujących w równaniu w normie przestrzeni L^∞ , co umożliwia przejście do granicy w każdym członie równania.

U w a g a 1.4. Jak już wspomniano w poprzednim paragrafie, Ball i Carr udowodnili istnienie rozwiązania zachowującego masę dla wszystkich $t > 0$ dla układu równań zwyczajnych jedynie przy założeniu (1.13). Według naszej wiedzy pozostaje otwarty problem, czy przy powyższym założeniu istnieje globalne w czasie zachowujące masę rozwiązanie przy przyjęciu, że współczynniki dyfuzji są dowolnymi liczbami dodatnimi. Warto zaznaczyć, że ten problem jest otwarty nawet wtedy, gdy współczynniki koagulacji i fragmentacji spełniają warunek ograniczoności (0.21).

Zwróćmy uwagę, że Twierdzenie 1.2 daje wprawdzie istnienie rozwiązania globalnego w czasie, o ile współczynniki koagulacji spełniają dodatkowy warunek $a_{i,j} \geq A_0 > 0$ dla pewnej stałej A_0 , wtedy jednak wiadomo tylko, że masa układu w chwili t nie przekracza masy początkowej (1.9). Z drugiej strony rezultaty Amanna [3] (dla $\Omega = \mathbb{R}^d$) i Guiaş'a [20] dają istnienie i jednoznaczność rozwiązania lokalnie w czasie wraz z zachowaniem masy. Jedynie w przypadku jednego wymiaru przestrzennego ([20]) rozwiązanie takie można przedłużyć dla wszystkich $t > 0$. Podstawowe znaczenie ma tu fakt, że odwzorowanie $\mathcal{F}(c) = (R_i(c))_{i \geq 1}$ przy warunku (0.21) spełnia warunek Lipschitza, jeśli określi się je w przestrzeni

$$\mathcal{X}_\infty = \left\{ c = (c_i)_{i \geq 1}, c_i \in L^\infty(\Omega), \sum_{i=1}^{\infty} i |c_i|_{L^\infty(\Omega)} < \infty \right\}.$$

Wspomnijmy także pracę [11], w której wykazano istnienie i jednoznaczność rozwiązania zachowującego masę początkową przy dość restryktywnych założeniach

$$d_i = D > 0 \quad \text{dla wszystkich } i \geq 1, \quad \sup_{i,k} \frac{a_{i,k}}{k} < \infty$$

$$\sum_{i=1}^{\infty} i^\theta c_i^0 \in L^\infty(\Omega) \quad \text{dla } 1 < \theta < 2.$$

Ostatnio w pracy [24] zaproponowano nielokalny model koagulacji-fragmentacji z dyfuzją. W modelu tym na przebieg procesów koagulacji i fragmentacji w ustalonym punkcie $x \in \Omega$ wpływają wartości stężeń wszystkich klastrów nie tylko w punkcie x , ale również w pewnym jego otoczeniu. Umożliwia to także uwzględnienie wpływu rozmiarów klastrów na przebieg

rozważanych procesów. W efekcie otrzymuje się nieskończony układ równań różniczkowo-całkowych. W tym artykule nie będziemy bliżej omawiać tego modelu i wspomnimy tylko, że z punktu widzenia analizy matematycznej przypomina on w pewnym sensie model jednorodny przestrzennie. Udowodniono, modyfikując metodę Ball'a i Carr'a z [4], istnienie rozwiązań zachowujących masę przy założeniach odpowiadających (1.1) i dowolnych dodatnich współczynnikach dyfuzji. Dodajmy jeszcze, że przy warunkach odpowiadających (0.21) odwzorowanie $\mathcal{F}_{\text{nlloc}} : \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{X}$ spełnia lokalny warunek Lipschitza, gdzie $\mathcal{F}_{\text{nlloc}}$ jest odpowiednikiem \mathcal{F} w modelu nielokalnym. W konsekwencji otrzymuje się rozwiązanie globalne w czasie, jednoznacznie wyznaczone i zachowujące masę.

1.2.1. Równania koagulacji z dyfuzją. W tym paragrafie przedstawimy rezultaty dotyczące (0.1)–(0.4) bez fragmentacji, tj. $b_{i,j} = 0$ dla $i, j \geq 1$. Oczywiście stosują się tu Twierdzenia 1.2 i 1.3. Istnienie rozwiązań w tym przypadku zostało udowodnione po raz pierwszy w [6] dla mnożliwych współczynników koagulacji $a_{i,j} = r_i r_j$.

Warto zwrócić uwagę na zawarty w tej pracy rezultat o jednoznaczności rozwiązania w pewnym szczególnym przypadku, mianowicie dla współczynników koagulacji postaci

$$(1.18) \quad a_{i,j} = (Ai + B)(Aj + B) \quad \text{dla } i, j \geq 1,$$

gdzie A i B to pewne stałe dodatnie. Warunek ten odpowiada (0.6). Rezultat ten wynika z następującego twierdzenia, mówiącego, że układ nieskończony (0.1)–(0.4) może być w pewnym sensie zredukowany do pewnego układu skończenie wielu równań typu reakcja dyfuzja.

Twierdzenie 1.5. *Przypuśćmy, że $a_{i,j} = (Ai + B)(Aj + B)$ dla wszystkich $i, j \geq 1$, $A, B \geq 0$, oraz że zachodzi (1.10). Niech $T > 0$, oraz niech $(c_k)_{k \geq 1}$ będzie rozwiązaniem zachowującym masę określonym na $\Omega \times (0, T)$. Dla dowolnej liczby całkowitej $K \geq i_0$ określmy $\varrho = \sum_{k=K}^{\infty} r_k c_k$. Wtedy*

$$\begin{aligned} \varrho &\in C([0, T]; L^2(\Omega)) \cap L^\infty(\Omega_T), \\ \varrho &\in L^2_{\text{loc}}([0, T]; D(L)) \cap W^{1,2}_{\text{loc}}([0, T]; L^2(\Omega)). \end{aligned}$$

Co więcej, dla dowolnego $K \geq i_0$, $\{c_1, \dots, c_{K-1}, \varrho = \sum_{k=K}^{\infty} r_k c_k\}$ jest rozwiązaniem następującego układu K równań,

$$(1.19) \quad \begin{aligned} \frac{\partial c_k}{\partial t} - d_k \Delta c_k &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{k-1} r_i r_{k-i} c_i c_{k-i} - r_k c_k \left(\sum_{i=1}^{K-1} r_i c_i + \varrho \right), \\ &\text{dla } k = 1, \dots, K-1, \\ \frac{\partial \varrho}{\partial t} - D \Delta \varrho &= \frac{1}{2} \sum_{i,j < K \leq i+j} r_i c_i r_j c_j r_{i+j} + A \left(\sum_{i=1}^{K-1} i r_i c_i \right) \varrho - \frac{B}{2} \varrho^2. \end{aligned}$$

Składowe rozwiązania są funkcjami gładkimi:

$$c_k \in C^\infty([0, T[\times \Omega) \quad \text{dla } k = 1, 2, \dots \quad \text{oraz} \quad \sum_{k=1}^{\infty} r_k c_k \in C^\infty([0, T[\times \bar{\Omega}).$$

Ponieważ jednoznaczność rozwiązania dla układu (1.19) dla dowolnego $K \geq i_0$ wynika z ogólnej teorii (np. [38]), łatwo stąd wydedukować jednoznaczność rozwiązania dla układu nieskończenie wielu równań. Dowód Twierdzenia 1.5 oparty jest na pewnych rachunkowych własnościach układu przy założeniu (1.18) i nie daje się rozszerzyć na przypadek ogólny.

Dodajmy, że wyżej wspomniana własność została wykorzystana przy dowodzie istnienia rozwiązania w pracy [31] dla modelu koagulacji, w którym przyjmuje się, że przemieszczenie dużych klastrów można zaniedbać, tzn. $D = 0$ dla $i > i_0$ w (1.10). Otrzymujemy wtedy układ równań cząstkowych sprzęgnięty z układem równań zwyczajnych. Metoda zwartości stosowana w powyższych twierdzeniach nie może być tu zastosowana wobec braku operatora drugiego rzędu w równaniach dla $i \geq i_0$. W konsekwencji trudno kontrolować zmienność ciągu aproksymującego $(c_i^N)_{N \geq i}$ dla $i > i_0$ względem zmiennej przestrzennej. Istnienie i jednoznaczność rozwiązania wykazuje się w [31] za pomocą singularnego zaburzenia kładąc najpierw $D > 0$ dla $i > i_0$ i przechodząc do granicy z $D \rightarrow 0$.

Ostatnio w pracy [22] udowodniono istnienie globalnego w czasie rozwiązania w przypadku dowolnych dodatnich współczynników dyfuzji i współczynników koagulacji spełniających (0.6) polepszając w pewnym sensie rezultat zawarty w Twierdzeniu 1.3.

Twierdzenie 1.6. *Przypuśćmy, że $d_i > 0$ dla $i \geq 1$ oraz $b_{i,j} = 0$ dla $i, j \geq 1$. Dodatkowo niech*

$$(1.20) \quad \underline{A}ij \leq a_{ij} \leq \bar{A}ij \quad \text{dla pewnych } \underline{A}, \bar{A} > 0 \text{ i dowolnych } i, j \geq 1.$$

Istnieje wtedy rozwiązanie układu koagulacji z dyfuzją określone dla wszystkich $t > 0$, spełniające następujące oszacowanie

$$(1.21) \quad \|c(\cdot, t)\|_{\mathcal{X}} \leq \|c^0\|_{\mathcal{X}} \min \left\{ 1, \frac{2\chi}{\chi + t} \right\},$$

gdzie $\chi = |\Omega|(4\underline{A}\|c^0\|_{\mathcal{X}})^{-1}$, a $|\Omega|$ oznacza miarę Lebesgue'a zbioru Ω .

W dowodzie tego twierdzenia ważną rolę pełni oszacowanie z dołu w (1.20). Podobny rezultat został także udowodniony wcześniej w pracy [27] dla odpowiadającego mu układu równań zwyczajnych.

2. Przemiana zol-żel. W tym rozdziale przedstawiamy rezultaty dotyczące analizy, wspomnianego we wstępie, efektu spadku masy całkowitej klastrów określonej w chwili t przez wielkość $\int_{\Omega} \sum_{i=1}^{\infty} ic_i(x, t) dx$ w sytuacji, gdy klastry nie rozpadają się. W literaturze fizycznej efekt ten uznawany

jest jako model przejścia fazowego *zol-żel* (patrz np. [10, 17, 19, 21, 32, 33, 46]). Jeśli tempo tworzenia się klastrów jest dostatecznie duże, to pewna część masy całkowitej układu gwałtownie lokuje się w coraz to większych klastrach i dalej opuszcza populację klastrów tworząc w efekcie tzw. hyperklastery zwany *zelem*, którego masa nie jest objęta powyższą formułą. Wyjaśnienie to wydaje się paradoksalne. Niewątpliwie wchodzi tu w grę zmiana skali opisu materii z poziomu mikro na poziom wyższy. Pamiętajmy również, że model koagulacji obejmuje jednocześnie ewolucję obiektów różniących się rozmiarami o kilka rzędów wielkości, jak to ma miejsce w przypadku procesu powstawania polimerów.

Bardziej precyzyjnie, przez *zol* rozumiemy populację wszystkich klastrów składających się ze skończonej liczby monoklastrów. Stężenie *zolu* M_s wyraża się zatem jako

$$M_s(x, t) = \sum_{i=1}^{\infty} i c_i(x, t).$$

Jeśli masa *zolu* jest zachowana tylko na pewnym ograniczonym odcinku czasu $0 \leq t \leq t_g < +\infty$, to moment czasu $t = t_g$ nazywamy *czasem żelacji*, a zjawisko zachodzące w momencie $t = t_g$ nosi miano przemiany *zol-żel* lub *żelacji*. Dla $t > t_g$, całkowita masa *zolu* równa jest $\int_{\Omega} M_s(x, t) dx$ i maleje wraz z $t \rightarrow \infty$.

Efekt ten po raz pierwszy był zaobserwowany w modelu kinetycznym żelacji Flory'ego i Stockmayera, który otrzymuje się kładąc w (0.1)–(0.4) $d_i = 0, b_{i,j} = 0$ dla $i, j \geq 1$ oraz

$$(2.22) \quad a_{ij} = ij \quad \text{dla } i, j \geq 1.$$

W tym przypadku znane jest rozwiązanie w postaci jawnej (patrz [33]). Jest ono dane następującym wzorem:

$$(2.23) \quad c_j(t) = \begin{cases} \frac{j^{j-2} \cdot t^{j-1}}{j!} \cdot e^{-jt} & \text{gdy } t \leq 1, \\ \frac{j^{j-2} \cdot e^{-j}}{j!} \cdot \frac{1}{t} & \text{gdy } t > 1, \end{cases}$$

dla $j = 1, 2, \dots$. Odpowiada ono warunkowi początkowemu $c_i(0) = \delta_{i,1}$, gdzie $\delta_{i,j}$ oznacza symbol Kroneckera. Zatem w chwili początkowej występują jedynie monoklastery. Masa *zolu* wynosi wtedy

$$M_s(t) = \begin{cases} 1 & \text{gdy } 0 \leq t < 1, \\ 1/t & \text{gdy } t > 1, \end{cases}$$

a więc żelacja zachodzi w chwili czasu $t_g = 1$. Co więcej, w tej samej chwili drugi moment rozwiązania $M_2 = \sum_{i=1}^{\infty} i^2 c_i$ wybucha przy $t = t_g$, tzn.

$$M_2(t) \rightarrow +\infty \quad \text{gdy } t \rightarrow 1.$$

Pojawia się naturalne pytanie, czy efekt żelacji występuje także dla współczynników koagulacji o innej postaci niż (2.22). Okazuje się, że zależy to od przyjętych założeń o tempie wzrostu jak też samej postaci współczynników a_{ij} . Dla przykładu w cytowanym już artykule [4] wykazano, że w przypadku jednorodnym przestrzennie, gdy

$$0 \leq a_{ij} \leq A(i+j), \quad b_{i,j} = 0, \quad \text{dla pewnego } A > 0, \text{ oraz } i, j \geq 1,$$

każde rozwiązanie zachowuje masę początkową. Można się zatem spodziewać, że dla współczynników koagulacji postaci

$$(2.24) \quad a_{i,j} = i^\omega j^\omega \quad \text{dla } i, j \geq 1 \text{ dla pewnego } \omega, 0 \leq \omega \leq 1$$

przypadek $\omega = 1/2$ jest krytyczny i tak rzeczywiście jest. W pracy [32] dla wartości ω z przedziału $(1/2, 1]$ znaleziono pewną szczególną rodzinę jawnych rozwiązań, dla których masa *zolu* nie jest zachowana. Ostatnio w artykule [23] udowodniono metodami probabilistycznymi, że w powyższym zakresie zmienności parametru ω , żelacja występuje dla rozwiązań startujących z dowolnych danych początkowych $c^0 \in l_{1,1}^+$.

Oczywiście powyższe fakty można łatwo przenieść na przypadek koagulacji z dyfuzją, o ile funkcja początkowa jest niezależna od zmiennej x . Przypadek niejednorodnego przestrzennie modelu koagulacji z dyfuzją był ostatnio analizowany w pracy [22]. Udowodniono tam, że w modelu koagulacji z dyfuzją ma również miejsce przemiana *zol-żel* przy następujących założeniach:

$$\underline{A}ij \leq a_{ij} \leq \bar{A}ij \quad \text{dla pewnych } \underline{A}, \bar{A} > 0 \text{ oraz } i, j \geq 1,$$

drugi moment warunku początkowego jest ograniczony, tj.

$$M_2(\cdot, 0) = \sum_{i=1}^{\infty} i^2 u_i \in L^\infty(\Omega),$$

współczynniki dyfuzji są takie same, tzn. $d_i = D > 0$ dla $i \geq 1$. Żelacja zachodzi wtedy w momencie t_g spełniającym następujące oszacowanie

$$\frac{1}{\bar{A} \cdot \|M_2(\cdot, 0)\|_{L^\infty(\Omega)}} \leq t_g \leq \frac{|\Omega|}{4\underline{A}\|c^0\|_{\mathcal{X}}}.$$

Warto podkreślić, że oszacowanie górne wynika z Twierdzenia 1.6, w którym zakłada się tylko, że współczynniki dyfuzji są stałymi dodatnimi. Oszacowanie dolne w mniej przejrzystej formie można także uzyskać przy założeniu, że współczynniki dyfuzji są stałe od pewnego miejsca (1.10).

Dalsze rozważania mają na celu bardziej precyzyjną analizę efektu spadku masy *zolu*. W pracy [22] udało się ją przeprowadzić w pewnym szczególnym przypadku, mianowicie: $d_i = D$ oraz $a_{ij} = A^2ij$ dla $i, j \geq 1$, gdzie $A > 0$. Po przeskalowaniu można przyjąć, że $D = A = 1$ bez straty ogólności.

Przypomnijmy, że rozwiązanie otrzymuje się jako granicę ciągu rozwiązań układów uciętych, a dokładniej N -ty układ ucięty (P^N) przyjmuje się kładąc

$$a_{ij} = 0 \quad \text{dla } i > N \text{ lub } j > N.$$

Łatwo widać, że (P^N) składa się z $2N$ równań. Co więcej, układ ten ma jedyne nieujemne rozwiązanie $(c_i^N)_{1 \leq i \leq 2N}$ spełniające równanie

$$\sum_{i=1}^{2N} \int_{\Omega} ic_i^N(x, t) dx = \sum_{i=1}^{2N} \int_{\Omega} ic_i(x) dx \quad \text{dla wszystkich } t > 0.$$

(por. [6] lub [44]). Kładąc $\mu^N = \sum_{i=1}^{2N} ic_i^N$, dostajemy (biorąc $g_i = i$) z (1.3), że

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mu^N}{\partial t} - \Delta \mu^N &= 0 \quad \text{w } \Omega \times (0, T), \\ \mu^N(x, 0) &= \sum_{i=1}^{2N} ic_i^0(x) \quad \text{dla } x \in \Omega. \end{aligned}$$

Zastosowanie twierdzenia porównawczego, będącego wnioskiem z zasady maksimum, prowadzi do wniosku, że (μ^N) jest ciągiem niemalejącym mającym granicę $\mu \in L^\infty(\Omega \times (0, \infty))$ taką, że

$$\mu^N \rightarrow \mu \quad \text{gdy } N \rightarrow +\infty \quad \text{prawie wszędzie w } \Omega \times (0, T),$$

oraz

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mu}{\partial t} - \Delta \mu &= 0 \quad \text{w } \Omega \times (0, T), \\ \mu(x, 0) &= M_s(x, 0) \quad \text{dla } x \in \Omega, \quad \frac{\partial \mu}{\partial \nu} = 0 \quad \text{dla } x \in \partial\Omega, \quad t > 0. \end{aligned}$$

Możemy teraz zdefiniować gęstość żelu M_g jako

$$M_g = \mu - M_s.$$

Dalej dowodzi się, że w wyrażeniu $\sum_{i=1}^{2N} c_i^N$ pierwszych N składników zbiega wraz z $N \rightarrow \infty$ do stężenia *zolu*, a pozostałe wyrazy zbiegają z kolei do gęstości żelu. Dokładniej rzecz ujmując mamy

$$\sum_{i=1}^N ic_i^N \rightarrow M_s, \quad \sum_{i=N+1}^{2N} ic_i^N \rightarrow M_g \quad \text{gdy } N \rightarrow \infty.$$

Dostajemy także dla $t > 0$:

$$\int_{\Omega} M_s(x, t) dx + \int_{\Omega} M_g(x, t) dx = \int_{\Omega} \sum_{i=1}^{\infty} c_i^0(x) dx$$

a więc w trakcie całej ewolucji czasowej układu całkowita masa zawarta w warunku początkowym jest zachowana. Część jej wchodzi w skład *zolu*, a część w skład *żelu*.

Z drugiej strony udowodniono, że wielkości M_s oraz M_g spełniają równania

$$\frac{\partial M_s}{\partial t} - \Delta M_s = -G, \quad \frac{\partial M_g}{\partial t} - \Delta M_g = G$$

w sensie dystrybucyjnym, tj. w $\mathcal{D}'(\Omega \times (0, +\infty))$, gdzie G jest miarą Radona określoną w granicy jako

$$(2.25) \quad G = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^N \sum_{j=N-i+1}^{\infty} i^2 c_i \cdot c_j \quad \text{w } \mathcal{D}'(\Omega \times (0, +\infty)).$$

Jednocześnie G jest funkcją prawie wszędzie równą zeru na zbiorze $\Omega \times (0, t_g)$. Wielkość G można zatem nazwać tempem produkcji *żelu*.

U w a g a 2.7. Nie jest do tej pory jasne, czy G jest miarą absolutnie ciągłą względem miary Lebesgue'a, czyli miarą zadaną przez pewną funkcję całkowalną, czy też nie.

Zauważmy, że Twierdzenie 1.5 daje jednoznaczność rozwiązania układu do momentu żelacji. Problem, czy rozważane rozwiązanie po rozpoczęciu żelacji jest jedynym, pozostaje jak na razie otwarty.

Układ koagulacji z dyfuzją może być przeformułowany w sposób umożliwiający lepszy wgląd w zachowanie się rozwiązania układu w otoczeniu momentu *żelacji*. Określmy mianowicie

$$(2.26) \quad g \equiv g(x, t, z) = \sum_{i=1}^{\infty} i(1 - e^{-iz})c_i(x, t), \quad \text{dla } x \in \Omega, t > 0 \text{ oraz } z > 0.$$

W pracy [22] (Twierdzenie 2.7) udowodniono, że g spełnia równanie

$$(2.27) \quad \frac{\partial g}{\partial t} - \Delta_x g = \frac{\partial g}{\partial z} \cdot g - G \quad \text{dla } z > 0,$$

w sensie dystrybucyjnym, gdzie G dane jest przez (2.25), a Δ_x oznacza operator Laplace'a względem zmiennej x . Co więcej,

$$(2.28) \quad g(x, t, 0) = 0 \quad \text{dla prawie wszystkich } x \in \Omega \text{ i wszystkich } t > 0.$$

Zwróćmy uwagę, że po opuszczeniu operatora Laplace'a w (2.27) dla $t < t_g$ otrzymujemy znane równanie Burgers'a dostarczające szkolnego przykładu na tzw. katastrofę gradientu polegającą na tym, że w czasie skończonym pochodna rozwiązania dąży do nieskończoności w pewnym punkcie (t_0, z_0) będącym punktem przecięcia charakterystyk równania. Dalej, rozwiązanie nie jest wobec tego określone w sensie klasycznym. W równaniu (2.27) występowanie członu G powoduje jednak, że rozwiązanie spełnia (2.28) w przeciwieństwie do odpowiedniego rozwiązania równania Burgers'a. W przypadku

bezdyfuzyjnym (lub jednorodnym przestrzennie), uwzględniając jawne rozwiązanie (2.23), można sprawdzić, że owa katastrofa gradientu pojawia się dokładnie dla $t = t_g$ i $z = 0$; wtedy także

$$G(t) = \begin{cases} 0 & \text{gdy } 0 \leq t < t_g = 1, \\ 1/t^2 & \text{gdy } t > t_g, \end{cases}$$

Jak już wspomniano, drugi moment rozwiązania danego przez (2.23) spełnia

$$M_2(t) = \sum_{i=1}^{\infty} i^2 c_i(t) \rightarrow +\infty \quad \text{gdy } t \rightarrow t_g.$$

W pracy [22] wyrażono przekonanie, że podobnie do przypadku jednorodnego przestrzennie, żelacji towarzyszy wybuch drugiego momentu rozwiązania. Prosty rachunek ujawnia, że

$$\frac{\partial g}{\partial z} \rightarrow M_2 \quad \text{gdy } z \rightarrow 0.$$

Dalsza analiza wykorzystuje metody formalne tzw. uzgodnionych rozwinięć asymptotycznych (ang. *matched asymptotic expansion*). Przyjmuje się, że pochodna $\frac{\partial g}{\partial z}$ wybucha w punkcie $(x, t, z) = (x_0, t_g, 0)$, przy czym bez straty ogólności można przyjąć, że $x_0 = 0$. Dalsze badanie równania (2.27) umożliwia określenie profilu asymptotycznego pochodnej w punkcie osobliwości. Tę informację udaje się, przynajmniej formalnie, przenieść na informację o samym rozwiązaniu układu koagulacji z dyfuzją. Mianowicie stężenie i -klastrow w pobliżu punktu $x = 0$, w którym rozpoczyna się *żelacja*, ma następujące zachowanie asymptotyczne

$$c_k(x, t) \sim \frac{a}{k^{5/2}} \quad \text{dla } 1 \ll k \ll \frac{|\ln |x||^2}{|x|^4},$$

dla pewnego $a = a(x, t) > 0$, oraz $t \geq t_g$.

Zwróćmy uwagę, że w powyższej formule pojawia się „przestrzenne ucięcie”, poza którym asymptotyka rozwiązania jest nieznana. Warto tu porównać ten formalny rezultat z asymptotyką rozwiązania jawnego (2.23):

$$c_k(t) \sim \frac{c}{k^{5/2}} \quad \text{dla } k \gg 1 \text{ oraz } t \geq t_g.$$

Na koniec zwróćmy uwagę na inny efekt odróżniający przypadek jednorodny przestrzennie od przypadku niejednorodnego z dyfuzją. Rozpatrzmy mianowicie układ koagulacji z dyfuzją w półprzestrzeni, tj. na $\mathbb{R}^d \times (0, \infty)$. Dowód istnienia rozwiązania wymaga wtedy drobnej modyfikacji wobec braku zwartości półgrupy generowanej przez operator Laplace’a w przestrzeni $L^1(\mathbb{R}^d)$. Wystarczy po prostu wykorzystać lokalną zwartość tej półgrupy. Weźmy dalej $a_{i,j} = ij$ oraz $d_i = 1$ i warunek początkowy $c_1^0(x) = \varphi(x)$ oraz

$c_i^0 = 0$ dla $i \geq 2$. Okazuje się, że wtedy drugi moment rozwiązania

$$u(x, t) = \sum_{i=1}^{\infty} i^2 c_i(x, t) \quad x \in \mathbb{R}^d, t > 0$$

spełnia równanie

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \Delta u + \frac{1}{2} u^2, \quad u(x, 0) = \varphi(x) \quad x \in \mathbb{R}^d,$$

co można wydedukować wstawiając w (1.3) $g_i = i^2$. Dla tego typu równań dobrze wiadomo, że gdy wykładnik p (u nas $p = 2$) spełnia nierówność $1 < p \leq 1 + 2/d$, to wszystkie rozwiązania nietrywialne wybuchają w czasie skończonym. Jeśli jednak $p > 1 + 2/d$, to istnieją rozwiązania ograniczone jednostajnie dla wszystkich $(x, t) \in \mathbb{R}^d \times (0, +\infty)$ startujące z funkcji początkowej φ w pewnym sensie „małej”, np. mniejszej niż przeskalowana odpowiednio funkcja określająca znane jądro Gaussa–Weierstrassa (pełną analizę można znaleźć np. w monografii [39]).

Wracając do układu koagulacji z dyfuzją otrzymujemy dla tak dobranej funkcji początkowej, w przypadku $d \geq 3$,

$$(2.29) \quad \sum_{i=1}^{\infty} i^2 c_i(x, t) \leq \psi(x, t) \quad \text{dla } x \in \mathbb{R}^d, t \in [0, T],$$

dla dowolnego ustalonego T i dla pewnej całkownej i ograniczonej funkcji ψ . Wróćmy teraz do (0.12). Nierówność (2.29) umożliwia przejście do granicy

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \int_0^T \int_{\mathbb{R}^d} \sum_{i=1}^k \sum_{j=k-i+1}^{\infty} i^2 c_i(x, t) c_j(x, t) dx dt = 0$$

a stąd już wynika, że żelacja nie pojawia się w przeciwieństwie do przypadku jednorodnego przestrzennie jak i modelu koagulacji z dyfuzją w obszarze ograniczonym. Wpływ dyfuzji w obszarze nieograniczonym powoduje tu szybkie rozproszenie się klastrów, a w konsekwencji obniżenie się ich lokalnego stężenia powoduje drastyczny spadek tempa koagulacji przeciwdziałając żelacji.

Cytowana literatura

- [1] D. J. Aldous, *Deterministic and stochastic models for coalescence (aggregation, coagulation): a review of the mean-field theory for probabilists*, Bernoulli, to appear.
- [2] H. Amann, *Dual semigroups and second order linear elliptic boundary value problems*, Israel J. Math. 45 (1983), 225–254.
- [3] H. Amann, *Coagulation-fragmentation processes*, preprint, 1998.
- [4] J. M. Ball, J. Carr, *The discrete coagulation-fragmentation equations: existence, uniqueness, and density conservation*, J. Statist. Phys. 61 (1990), 203–234.

- [5] J. M. Ball, J. Carr, O. Penrose, *The Becker–Döring cluster equations: basic properties and asymptotic behaviour of solutions*, Comm. Math. Phys. 104 (1986), 657–692.
- [6] Ph. Bénilan, D. Wrzosek, *On an infinite system of reaction-diffusion equations*, Adv. Math. Sci. Appl. 7 (1997), 349–364.
- [7] J. Carr, *Asymptotic behaviour of solutions to the coagulation-fragmentation equations. I. The strong fragmentation case*, Proc. Roy. Soc. Edinburgh Sect. A 121 (1992), 231–244.
- [8] J. Carr, F. P. da Costa, *Asymptotic behavior of solutions to the coagulation-fragmentation equations. II. Weak fragmentation*, J. Statist. Phys. 77 (1994), 89–123.
- [9] J. Carr, R. M. Dunwell, *Asymptotic behaviour of solutions to the Becker–Döring equations*, Proc. Edinburgh Math. Soc. (2), to appear.
- [10] R. J. Cohen, G. B. Benedek, *Equilibrium and kinetic theory of polymerization and the sol-gel transition*, J. Phys. Chem. 86 (1986), 3696–3714.
- [11] J. F. Collet, F. Poupaud, *Existence of solutions to coagulation-fragmentation systems with diffusion*, Transport Theory Statist. Phys. 25 (1996), 503–513.
- [12] J. F. Collet, F. Poupaud, *Asymptotic behaviour of solutions to the diffusive coagulation-fragmentation system*, Phys. D 114 (1998), 123–146.
- [13] F. P. da Costa, *Existence and uniqueness of density conserving solutions to the coagulation-fragmentation equations with strong fragmentation*, J. Math. Anal. Appl. 192 (1995), 892–914.
- [14] F. da Costa, *A finite dimensional dynamical model for gelation in coagulation processes*, J. Nonlinear Sci. 8 (1998), 619–653.
- [15] P. B. Dubovskii, *Mathematical Theory of Coagulation*, Lecture Notes Ser. 23, Seoul Nat. Univ., 1994.
- [16] A. Eibeck, W. Wagner, *Approximative solution of the coagulation-fragmentation equation by stochastic particle systems*, preprint WIAS 433, 1998.
- [17] M. H. Ernst, R. M. Ziff, E. M. Hendriks, *Coagulation processes with a phase transition*, J. Colloid Interface Sci. 97 (1984), 266–277.
- [18] H. Galina, *A kinetic model of step-wise alternating polymerization for two bi-functional monomers*, Macromol. Theory Simul. 4 (1995), 801–809.
- [19] H. Galina, A. Szustalewicz, *A kinetic theory of stepwise cross-linking polymerization with substitution effect*, Macromolecules 22 (1989), 3124–3129.
- [20] F. Guias, *Coagulation-fragmentation processes: relations between finite particles models and differential equations*, preprint 98–41 (SFB 359), Universität Heidelberg, 1998.
- [21] E. M. Hendriks, M. H. Ernst, R. M. Ziff, *Coagulation equations with gelation*, J. Statist. Phys. 31 (1983), 519–563.
- [22] M. A. Herrero, J. J. L. Velázquez, D. Wrzosek, *Sol-gel transition in a coagulation-diffusion model*, preprint, 1998.
- [23] I. Jeon, *Existence of gelling solutions for coagulation-fragmentation equations*, Comm. Math. Phys. 194 (1998), 541–567.
- [24] M. Lachowicz, D. Wrzosek, *A nonlocal coagulation-fragmentation model*, Appl. Math. (Warsaw), to appear.
- [25] Ph. Laurençot, *Global solutions to the discrete coagulation equations*, Matematika, to appear.
- [26] Ph. Laurençot, *Singular behaviour of finite approximations to the addition model*, Nonlinearity 12 (1999), 229–239.
- [27] Ph. Laurençot, *On a class of continuous coagulation–fragmentation equations*, preprint WIAS 435, 1998.

- [28] Ph. Laurençot, D. Wrzosek, *Fragmentation-diffusion model. Existence of solutions and asymptotic behaviour*, Proc. Roy. Soc. Edinburgh Sect. A, 128 (1998), 759–774.
- [29] Ph. Laurençot, D. Wrzosek, *The Becker–Döring model with diffusion. I. Basic properties of solutions*, Colloq. Math. 75 (1998), 245–269.
- [30] Ph. Laurençot, D. Wrzosek, *The Becker–Döring model with diffusion. II. Long time behaviour*, J. Differential Equations 148 (1998), 268–291.
- [31] Ph. Laurençot, D. Wrzosek, *Coagulation model with partial diffusion*, Z. Angew. Math. Phys., to appear.
- [32] F. Leyvraz, *Existence and properties of post-gel solutions for the kinetic equations of coagulation*, J. Phys. A 16 (1983), 2861–2873.
- [33] F. Leyvraz, H. R. Tschudi, *Singularities in the kinetics of coagulation processes*, J. Phys. A 14 (1981), 3389–3405.
- [34] R. H. Martin, M. Pierre, *Nonlinear reaction-diffusion systems*, in *Nonlinear Equations in Applied Science*, edited by W. F. Ames, C. Rogers, Academic Press, Boston, 1992.
- [35] J. B. McLeod, *On an infinite set of non-linear differential equations*, Quart. J. Math. Oxford Ser. (2) 13 (1962), 119–128.
- [36] J. B. McLeod, *On an infinite set of non-linear differential equations (II)*, Quart. J. Math. Oxford Ser. (2) 13 (1962), 193–205.
- [37] J. R. Norris, *Smoluchowski’s coagulation equation: uniqueness, non-uniqueness and a hydrodynamic limit for the stochastic coalescent*, Ann. Appl. Probab., to appear.
- [38] A. Pazy, *Semigroups of Linear Operators and Applications to Partial Differential Equations*, Springer-Verlag, New York 1983.
- [39] A. A. Samarski, V. Galaktionov, S. Kurdyumov, A. Mikhailov, *Blow-up in Quasilinear Parabolic Equations*, Walter de Gruyter, Berlin 1995.
- [40] M. Slemrod, *Trend to equilibrium in the Becker–Döring cluster equations*, Nonlinearity 2 (1989), 429–443.
- [41] M. Smoluchowski, *Drei Vorträge über Diffusion, Brownsche Molekularbewegung und Koagulation von Kolloidteilchen*, Physik. Zeitschr. 17 (1916), 557–599.
- [42] M. Smoluchowski, *Versuch einer mathematischen Theorie der Koagulationskinetik kolloider Lösungen*, Zeitschrift f. physik. Chemie 92 (1917), 129–168.
- [43] D. Wrzosek, *On an infinite system of reaction-diffusion equations in the theory of polymerization and sol-gel transition, w: Free boundary problems, theory and applications (Zakopane, 1995)*, 441–445, Pitman Res. Notes Math. Ser., 363, Longman, Harlow, 1996.
- [44] D. Wrzosek, *Existence of solutions for the discrete coagulation-fragmentation model with diffusion*, Topol. Methods Nonlinear Anal. 9 (1997), 279–296.
- [45] A. Ziabicki, *Generalized theory of nucleation kinetics. IV. Nucleation as diffusion in the space of cluster dimensions, positions, orientations, and internal structure*, J. Chem. Phys. 85 (1986), 3042–3057.
- [46] R. M. Ziff, *Kinetics of polymerization*, J. Statist. Phys. 23 (1980), 801–809.