

LIÇÃO DE SÍNTESE\* :  
ALGUNS ASPECTOS DA ANÁLISE MATEMÁTICA DE  
EQUAÇÕES DE COAGULAÇÃO-FRAGMENTAÇÃO

Fernando Pestana da Costa<sup>†</sup>

25 de Maio de 2009

**Resumo**

Numa primeira parte faz-se uma descrição dos tipos de equações de coagulação-fragmentação mais comuns nas literaturas matemática e científica, referindo-se alguns aspectos históricos considerados relevantes, bem como várias áreas de aplicações. Na segunda parte descrevem-se resultados matemáticos relativos a existência e unicidade de soluções de alguns destes sistemas, nomeadamente os sistemas discretos de Smoluchowski e de coagulação-fragmentação: começando com uma breve apresentação dos espaços funcionais utilizados, passam-se depois em revista os resultados sobre existência de soluções fornecendo-se uma descrição breve das ideias subjacentes às demonstrações. Esta parte termina com uma secção dedicada aos problemas de unicidade. Nas terceira e quarta partes descrevem-se diversos aspectos do comportamento de soluções. Focam-se com especial atenção questões sobre a convergência para equilíbrios a tempos longos, sobre o comportamento auto-semelhante de soluções e sobre a conservação, ou não-conservação, de densidade. Todas estas questões, além da óbvia relevância matemática, têm também interpretações físicas de clara importância para as aplicações.

## Conteúdo

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO</b>	<b>2</b>
1.1	Os processos de coagulação e de fragmentação . . . . .	4
1.2	As equações de coagulação de Smoluchowski . . . . .	5
1.3	As equações de coagulação Oort-Hulst-Safronov . . . . .	8
1.4	As equações de fragmentação . . . . .	9
1.5	As equações de coagulação-fragmentação . . . . .	11

---

\*LIÇÃO DE SÍNTESE submetida à Universidade Aberta como parte dos requisitos para as provas de Agregação em Matemática. Sujeita a discussão pública em 18 de Dezembro de 2009.

<sup>†</sup>Departamento de Ciências e Tecnologia, Universidade Aberta, Lisboa, Portugal e Centro de Análise Matemática, Geometria e Sistemas Dinâmicos, Instituto Superior Técnico, Universidade Técnica de Lisboa, Lisboa, Portugal, (fcosta@univ-ab.pt, fcosta@math.ist.utl.pt).

1.6	As equações de Becker-Döring . . . . .	12
1.7	As equações de coagulação-fragmentação com fragmentação não-linear . . . . .	13
1.8	As equações de coagulação-fragmentação com termos difusivos . . .	15
1.9	Equações com termos de transporte e cinéticos . . . . .	16
1.10	Outros modelos . . . . .	17
1.10.1	Modelos com aglomerados multi-indexados . . . . .	17
1.10.2	Modelos de coagulação de intervalos . . . . .	19
1.10.3	Modelos de proliferação em dinâmica de populações . . . . .	21
1.11	Outro tipo de questões envolvendo as equações de coagulação e de fragmentação . . . . .	22
<b>2</b>	<b>EXISTÊNCIA E UNICIDADE DE SOLUÇÕES DE SISTEMAS DISCRETOS DE COAGULAÇÃO-FRAGMENTAÇÃO</b>	<b>23</b>
2.1	Espaços de densidades finitas . . . . .	24
2.2	Equações de Smoluchowski discretas . . . . .	25
2.3	Equações de coagulação-fragmentação discretas . . . . .	31
2.4	Sobre a unicidade de soluções . . . . .	36
<b>3</b>	<b>COMPORTAMENTO ASSIMPTÓTICO DE SOLUÇÕES DE SISTEMAS DE COAGULAÇÃO-FRAGMENTAÇÃO</b>	<b>40</b>
3.1	Convergência para equilíbrios e transições de fase . . . . .	40
3.1.1	Equações com fragmentação forte . . . . .	41
3.1.2	Equações com fragmentação fraca . . . . .	45
3.2	Comportamento auto-semelhante das soluções . . . . .	51
3.2.1	Nas equações de coagulação de Smoluchowski . . . . .	51
3.2.2	Nos modelos de adição com entrada de monómeros . . . . .	57
<b>4</b>	<b>CONSERVAÇÃO DE DENSIDADE E GELIFICAÇÃO</b>	<b>61</b>
	AGRADECIMENTOS	66
	REFERÊNCIAS	67

## 1 INTRODUÇÃO

Os fenómenos de coagulação (coalescência, aglomeração, agregação) e os fenómenos de fragmentação são ubíquos em muitas áreas das ciências físicas [35, 60, 70], astronómicas [156], químicas [189], atmosféricas [152, 158], biológicas [6, 139], ambientais [81] e em vários processos tecnológicos [73, 82]. A sua modelação quantitativa pode ser efectuada por diversos instrumentos matemáticos, nomeadamente por processos estocásticos, por métodos de simulação computacional, ou por análise

matemática, ou numérica, de equações diferenciais de certo tipo, as quais são genericamente designadas por equações de coagulação-fragmentação. Centraremos a nossa atenção numa classe destas equações, designadas por equações de coagulação-fragmentação discretas, mas também abordaremos alguns aspectos de uma outra classe, as equações de coagulação-fragmentação contínuas.

O objectivo principal deste trabalho é passar em revista resultados de análise matemática relativos a existência, unicidade e diversos aspectos do comportamento das soluções, com especial enfoque para questões e problemas em cuja investigação estivemos, em alguma altura, envolvidos e sobre os quais fizemos alguma contribuição para a literatura.

Com o objectivo de fornecer uma panorâmica mais alargada desta área, nesta parte introductória, iremos fazer uma breve apresentação, sem entrarmos em descrições aprofundadas ou em detalhes técnicos, não apenas dos sistemas cujo comportamento analisaremos mais detalhadamente na sequência, mas também dos mais importantes tipos de equações de coagulação-fragmentação que se encontram na literatura matemática, incluindo muitos que não voltaremos a referir.

A literatura matemática sobre este tipo de equações cresceu enormemente nas últimas duas décadas. De tal modo que uma revisão crítica abrangente desta área não pode já ser feita num trabalho com as presentes características. Se isto é verdade para a literatura matemática, é-o por maioria de razão para a literatura de modelação formal, não-rigorosa, e para as literaturas Física e de outras disciplinas científicas e tecnológicas, as quais são extremamente vastas e diversificadas. São também uma fonte aparentemente inesgotável de problemas matemáticos interessantes e difíceis, merecendo, pois, de qualquer matemático que trabalhe nesta área uma atenção pelo menos tão grande quanto aquela que deve dedicar à literatura matemática propriamente dita. Atendendo a isto, não se deverá estranhar a existência dum importante número de referências bibliográficas que não poderão certamente ser classificadas como literatura matemática mas que são relevantes, mesmo fundamentais, para o trabalho matemático nesta área.

Apesar de ser uma área relativamente recente, a análise matemática das equações de coagulação-fragmentação tem presentemente na literatura já alguns artigos de revisão que poderão ser úteis para quem pretender obter uma visão de conjunto dos problemas, métodos e resultados existentes. Os dois mais recentes, [111, 181], têm pontos de sobreposição importantes com os assuntos que desenvolveremos neste trabalho. Uma outra referência interessante, se bem que já desactualizada em muitos aspectos, é [61]. O artigo [59] foi o primeiro artigo de revisão a surgir sobre a modelação matemática deste tipo de problemas e, se bem que muito pouco do seu conteúdo seja matematicamente rigoroso, constitui ainda uma fonte muito interessante sobre a literatura nesta área anterior ao início da década de 1970. Finalmente, mesmo que lateral para o tema do presente trabalho, é importante ainda referir o artigo de David Aldous [2], o qual teve uma importância crucial na chamada de atenção dos probabilistas para esta área, cuja resultado foi a verdadeira explosão contemporânea de trabalhos envolvendo uma abordagem estocástica aos fenómenos de coagulação e de fragmentação (ver, por exemplo, [18]). Estes desenvolvimen-

tos na abordagem probabilística, à semelhança do que se passa com os estudos de análise numérica (cf., por exemplo, [118]), são, na maior parte dos casos, transversais à abordagem analítica do presente trabalho e só muito esporadicamente serão referidos na sequência.

### 1.1 Os processos de coagulação e de fragmentação

Por coagulação (ou coalescência, ou aglomeração, ou agregação) entende-se a classe de fenómenos pelos quais ocorre o crescimento do tamanho (ou da massa) de partículas através da sua colisão e junção com outras de natureza semelhante. Na esmagadora maioria dos casos (mas não em todos) as colisões simultâneas de mais de duas partículas são extremamente raras e não são consideradas.

Na Figura 1 apresenta-se um esquema da coagulação entre uma partícula de tamanho (ou massa)  $x$  com outra de tamanho (ou massa)  $y$ . Como veremos mais abaixo, há situações de modelação em que os tamanhos das partículas variam continuamente (em  $\mathbb{R}^+$ ) e outras há em que os tamanhos são discretos, indexados em  $\mathbb{N}$ .

O processo recíproco, de fragmentação espontânea, é, como o próprio nome indica, aquele pelo qual uma partícula pode originar duas ou mais partículas menores de natureza semelhante à primeira, tal como se representa esquematicamente na Figura 2.

Ao invés do que se passa com a coagulação, processos de fragmentação múltipla, em que uma dada partícula produz não apenas duas partículas menores mas uma distribuição de um número, à partida variável, de partículas-filha, são extremamente importantes na prática e não podem, em geral, ser ignorados. Um outro modo de fragmentação que por vezes é considerado é a fragmentação induzida por colisões. Este processo pode ser encarado como a sobreposição de duas etapas sucessivas: um processo de coagulação que gera um grande agregado fortemente instável que instantaneamente (na escala de tempos considerada) se fragmenta em agregados menores.

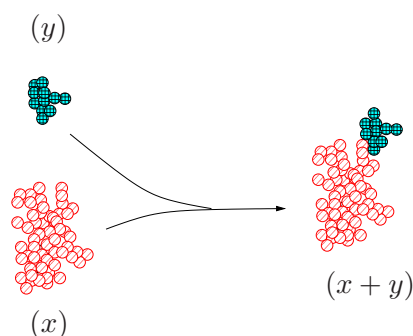


Figura 1: Esquema do processo de coagulação de uma partícula de tamanho  $x$  com uma outra de tamanho  $y$ .

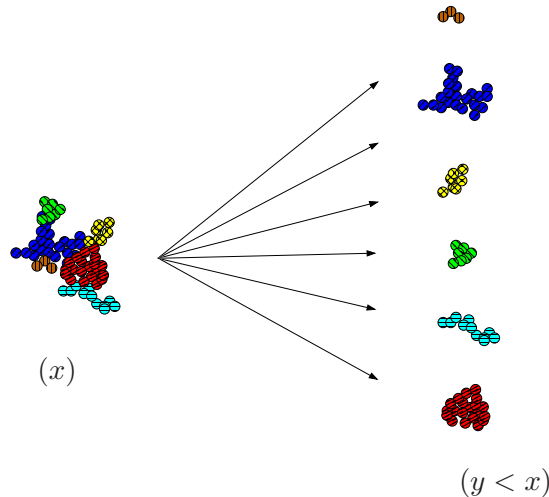


Figura 2: Esquema do processo de fragmentação espontânea múltipla de uma partícula de tamanho  $x$  em várias outras partículas de menores tamanhos  $y < x$ .

As equações diferenciais de coagulação-fragmentação surgem da tentativa de modelar matematicamente os processos esquematicamente representados nas figuras 1 e 2. Consoante as hipóteses de modelação feitas, assim surgem diversas classes de equações de coagulação-fragmentação. Todas elas, no entanto, podem ser consideradas como equações de dinâmica de populações (de partículas) com estrutura (oriunda dos tamanhos ou massas diversos). Esta observação é menos útil do que possa parecer, atendendo a que, devido à estrutura especial da maioria das equações de coagulação, os métodos gerais utilizados em dinâmica de populações com estrutura (ver, por exemplo, [183]) não são, normalmente, aplicáveis.

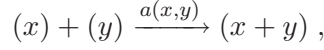
Nas restantes secções desta parte do trabalho referiremos alguns dos modelos de coagulação-fragmentação mais largamente estudados do ponto de vista matemático. Na maioria dessas secções citaremos apenas a bibliografia historicamente mais importante. As referências matematicamente mais relevantes e actuais serão indicadas e analisadas nas partes posteriores deste trabalho.

## 1.2 As equações de coagulação de Smoluchowski

A equação de coagulação originalmente proposta em 1916 pelo físico Marian von Smoluchowski, no âmbito de estudos sobre a cinética da formação de coloides [167, 168], constitui o protótipo deste tipo de equações e é uma das mais bem estudadas do ponto de vista matemático, embora continue a albergar alguns problemas em aberto, como teremos oportunidade de constatar na sequência.

Represente-se o processo de coagulação na Figura 1 pela notação usual da cinética

química,



onde  $a(x, y)$  representa o coeficiente de velocidade da reacção de coagulação entre o aglomerado de massa  $x$  (ou  $x$ -aglomerado) e o de massa  $y$  (ou  $y$ -aglomerado). Usualmente estes coeficientes dependem apenas das massas dos aglomerados, mas podem ocorrer situações em que seja importante considerar que esta função depende também do tempo [174, 185] ou de outras características do sistema a modelar (cf. casos nas secções 1.9 e 1.10). No presente contexto esta função é normalmente chamada coeficiente, ou núcleo, de coagulação. No caso das massas dos aglomerados só poderem assumir valores discretos, múltiplos de uma massa mínima considerada como unitária (a massa do 1-aglomerado ou *monómero*), utiliza-se normalmente a notação  $a_{x,y}$  em vez de  $a(x, y)$ . Também para mantermos a notação usual, designaremos por  $i, j, k, \dots$  as massas dos aglomerados quando estas forem discretas. O mecanismo de interacção entre os diferentes aglomerados é traduzido matematicamente nas propriedades assumidas para as funções  $a(x, y)$ . A única propriedade matemática geral a que todos os tipos de coeficientes têm de obedecer é a simetria e não-negatividade:  $a(x, y) = a(y, x) \geq 0$ .

Na Tabela 1 apresentam-se alguns dos núcleos de coagulação mais comuns na literatura (ver referências citadas em [42, 59, 111]).

$a(x, y)$	Comentário
1	Coagulação browniana aproximada Polimerização de cadeias lineares
$x + y$	Polimerização de cadeias ramificadas do tipo $ARB_{f-1}$ ( $f \gg 1$ ), Caso limite de coagulação gravitacional
$x^{-2/3} + y^{-2/3}$	Crescimento difusional de cristalitos metálicos suportados
$xy$	Polimerização de cadeias ramificadas do tipo $RA_f$ ( $f \gg 1$ ).
$x^\alpha y^\beta + x^\beta y^\alpha$	Caso que inclui Golovin ( $\beta = \alpha - 1 = 1$ ) e Stockmayer ( $\beta = \alpha = 1$ )
$(x^{1/3} + y^{1/3})(x^{-1/3} + y^{-1/3})$	Coagulação browniana (regime contínuo)
$(x^{1/3} + y^{1/3})^2(x^{-1} + y^{-1})^{1/2}$	Coagulação browniana (regime molecular livre).
$(x^{1/3} + y^{1/3})^3$	Coagulação tangencial (perfil linear de velocidades).
$(x^{1/3} + y^{1/3})^7$	Coagulação tangencial (perfil não-linear de velocidades).
$(x^{1/3} + y^{1/3})^2  x^{1/3} - y^{1/3} $	Deposição gravitacional (partículas maiores que $\sim 50\mu\text{m}$ ).
$(x^\alpha + y^\alpha)^\beta  x^\gamma - y^\gamma $	Coagulação balística ( $\alpha, \beta, \gamma \geq 0, \alpha\beta + \gamma \leq 1$ ).

**Tabela 1.** Alguns núcleos de coagulação  $a(x, y)$  mais comuns.

Começamos por considerar o caso de massas discretas, que foi, precisamente,

o caso tratado por Smoluchowski. Assumindo que o sistema é espacialmente homogéneo, represente-se por  $c_j = c_j(t)$  a concentração (ou densidade) do  $j$ -aglomerado no instante  $t$ , e por  $c = (c_j)$  o vector das concentrações dos vários aglomerados presentes.

Assumindo válida a lei de acção de massas da cinética química, a taxa de variação de  $c_j$  é dada pela equação diferencial

$$\dot{c}_j = Q_c(c)(j) \quad (1)$$

onde  $\dot{c}_j$  representa a derivada de  $c_j$  (em ordem a  $t$ ) e  $Q_c(c)(j)$  é o termo que traduz matematicamente as reacções de coagulação (donde o  $c$  em índice) que afectam a componente  $j$  do vector de concentrações  $c$ . Este termo de reacção é constituído por duas componentes, a saber,

1. a criação de  $j$ -aglomerados a partir da reacção entre aglomerados menores de massas apropriadas,  $(j-k) + (k) \rightarrow (j)$ , com  $k = 1, \dots, j-1$ , e  $j \geq 2$ , a que corresponde o termo

$$Q_1(c)(j) := \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{j-1} a_{j-k,k} c_{j-k} c_k, \quad (2)$$

definindo-se  $Q_1(c)(1) \equiv 0$ .

2. a destruição de  $j$ -aglomerados a partir da reacção entre estes e quaisquer outros aglomerados presentes no sistema,  $(j) + (k) \rightarrow (j+k)$ , com  $k = 1, 2, \dots$ . Não impondo *a priori* limitação ao tamanho máximo dos aglomerados presentes no sistema, a este processo corresponde o termo

$$Q_2(c)(j) := c_j \sum_{k=1}^{\infty} a_{j,k} c_k. \quad (3)$$

Assim, o termo de reacção no membro direito de (1) é

$$\begin{aligned} Q_c(c)(j) &:= Q_1(c)(j) - Q_2(c)(j) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{j-1} a_{j-k,k} c_{j-k} c_k - c_j \sum_{k=1}^{\infty} a_{j,k} c_k, \quad j \in \mathbb{N}. \end{aligned} \quad (4)$$

O sistema de Smoluchowski (discreto) é o sistema com uma infinidade contável de equações diferenciais ordinárias (1) em que o membro direito é dado por (4).

Em várias situações é mais adequado considerar-se a versão do sistema de Smoluchowski, na qual as massas dos aglomerados variam continuamente em  $\mathbb{R}^+$ . Esta versão contínua, primeiro considerada por Hans Müller em 1928 [59, 137], pode ser escrita como a seguinte equação integro-diferencial

$$\partial_t c(t, x) = Q_c(c)(t, x) \quad (5)$$

onde  $c(t, x)$  é a concentração (ou densidade) dos  $x$ -aglomerados no instante  $t$ , e o termo da reacção é agora

$$\begin{aligned} Q_c(c)(\cdot, x) &:= Q_1(c)(\cdot, x) - Q_2(c)(\cdot, x) \\ &:= \frac{1}{2} \int_0^x a(x-y, y)c(\cdot, x-y)c(\cdot, y)dy - c(\cdot, x) \int_0^\infty a(x, y)c(\cdot, y)dy. \end{aligned} \quad (6)$$

Os primeiros trabalhos matemáticos sobre (1) parecem ser os artigos de Brice McLeod [129] e [130]. Sobre a versão contínua (5) os primeiros artigos matemáticos são possivelmente os de Morgenstern [136] e de Melzak [132] (este último também incluindo fragmentação, cf. secção 1.5). Nas últimas duas décadas assistiu-se a um enorme progresso na compreensão de diversas questões relativas à existência, unicidade, regularidade de soluções, e a diversos problemas relacionados com o seu comportamento assintótico. Parte desses resultados serão analisados mais adiante neste trabalho.

### 1.3 As equações de coagulação Oort-Hulst-Safronov

Uma outra equação de coagulação que tem recentemente recebido alguma atenção, é a equação (contínua) de Oort-Hulst-Safronov [142],[156, Chapter 8], que surgiu inicialmente ligada à modelação de fenómenos astronómicos. Esta equação tem também a forma geral (5) da equação de Smoluchowski, mas difere desta quer no termo de formação de  $x$ -aglomerados a partir da reacção de outros aglomerados menores,  $Q_1(c)(\cdot, x)$ , quer no termo de destruição  $Q_2(c)(\cdot, x)$ . Neste caso tem-se

1. a taxa de criação de  $x$ -aglomerados a partir da reacção entre aglomerados menores de massas apropriadas não depende das massas dos aglomerados mas de uma medida média dos agregados em causa, mais precisamente:

$$Q_1(c)(\cdot, x) := -\partial_x \left( c(\cdot, x) \int_0^x ya(x, y)c(\cdot, y)dy \right). \quad (7)$$

2. a destruição de  $x$ -aglomerados, a partir da reacção destes com outros aglomerados presentes no sistema, ocorre unicamente quando os outros aglomerados têm massa superior, ou seja, trata-se duma espécie de sedimentação dos  $x$ -aglomerados nos outros de tamanho superior:

$$Q_2(c)(\cdot, x) := c(\cdot, x) \int_x^\infty a(x, y)c(\cdot, y)dy. \quad (8)$$

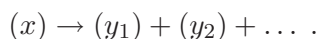
Estas diferentes definições dos termos de reacção, relativamente ao que se passa com a equação de Smoluchowski, reflectem-se em diversas propriedades distintas das soluções dos dois sistemas, a mais notável das quais é a velocidade finita de propagação da solução [62], que contrasta notoriamente com a velocidade infinita de propagação no caso da equação de Smoluchowski (ver, por exemplo, [39] para o caso discreto). Apesar da clara diferença entre as equações e do comportamento distinto das soluções, as duas estão relacionadas entre si, podendo ser encaradas como casos limite de famílias de equações de coagulação indexadas a um parâmetro [62, 98].

## 1.4 As equações de fragmentação

As primeiras referências a processos de fragmentação surgiram no âmbito da química, nos estudos cinéticos da degradação de cadeias poliméricas (ver, e.g., [159]). A primeira referência matemática à modelação do processo de fragmentação parece ter surgido em estudos probabilísticos e ser devida a Kolmogorov [93], que também sugeriu e orientou o importante estudo subsequente de A.F. Filippov [75]. A primeira referência matemática não-probabilista a estes processos está incluída no trabalho de Melzak sobre a equação de coagulação-fragmentação contínua [132]. Para a versão discreta a primeira referência parece ser o artigo de Spouge [169].

Nesta secção iremos apenas referir-nos à fragmentação espontânea de agregados, que resulta em termos lineares nas equações cinéticas. Outros processos, tais como a fragmentação colisional ou a dispersão volumétrica, estão intimamente relacionados com os processos de coagulação, resultam em contribuições não-lineares para os termos de fragmentação e serão introduzidos na secção 1.7.

Represente-se o processo de fragmentação na Figura 2 pela notação usual da cinética química<sup>1</sup>,



Seja  $B(x)$  o coeficiente de velocidade de reacção para a fragmentação dos  $x$ -aglomerados e seja  $\psi(x, y)$  o número médio de partículas de massa  $y$  produzido pela fragmentação de uma partícula de massa  $x$ . No caso das massas serem discretas, voltando estas a serem representadas por  $i, j, k, \dots$ , usaremos a notação usual  $B_j$  em vez de  $B(j)$ , etc.

A conservação de massa em cada reacção de fragmentação implica que a massa total das partículas-filha tenha de ser igual à massa da partícula original, ou seja, tem de se verificar

$$\int_0^x y\psi(x, y)dy = x \quad \text{ou} \quad \sum_{k=1}^{j-1} k\psi_{j,k} = j \quad (9)$$

consoante consideremos o caso contínuo ou o discreto, respectivamente.

Concentremo-nos agora no processo discreto. Assumindo válida a lei de acção de massas da cinética química, a taxa de variação de  $c_j$  é dada pela equação diferencial análoga a (1)

$$\dot{c}_j = Q_f(c)(j) \quad (10)$$

onde agora  $Q_f(c)(j)$  é o termo que traduz matematicamente as reacções de fragmentação (donde o  $f$  em índice) que afectam a componente  $j$  do vector de concentrações  $c$ . Este termo de reacção é constituído pelas seguintes duas componentes

1. a destruição de  $j$ -aglomerados pela sua fragmentação  $(j) \rightarrow (k) + \dots$ , a que corresponde a parcela

$$Q_3(c)(j) := B_j c_j, \quad (11)$$

---

<sup>1</sup>A notação não é das melhores, já que sugere que os número de partículas-filha ( $y_k$ ) é, quanto muito, contável: de facto nada impede que a distribuição em causa seja contínua.

e  $Q_3(c)(1) = 0$ .

2. a criação de  $j$ -aglomerados a partir da fragmentação de aglomerados maiores,  $(j+k) \rightarrow (j) + \dots$ , com  $k = 1, \dots$ , a que corresponde a contribuição

$$Q_4(c)(j) := \sum_{k=1}^{\infty} B_{j+k} \psi_{j+k,j} c_{j+k}, \quad (12)$$

Daqui se conclui que o termo de reacção no membro direito de (10) é

$$Q_f(c)(j) := -Q_3(c)(j) + Q_4(c)(j), \quad j \in \mathbb{N}. \quad (13)$$

Uma hipótese frequentemente feita acerca do processo de fragmentação e que é válida em determinadas situações, como por exemplo na degradação de polímeros [189], é que, tal como a coagulação, a fragmentação é binária, isto é, cada partícula que se fragmenta fá-lo gerando apenas duas partículas-filha. Nestas condições, a simetria do processo físico implica que se tenha de ter  $\psi_{i,j} = \psi_{i,i-j}$ . Consequentemente, a conservação de massa (9) implica que  $\sum_{k=1}^{j-1} \psi_{j,k} = 2$  que tem a interpretação, óbvia, de que o número médio de partículas-filha em cada fragmentação é dois<sup>2</sup>. Assim, designando por  $b_{j,k}$  o coeficiente cinético da equação de fragmentação binária  $(j+k) \rightarrow (j) + (k)$ , ou seja  $b_{j,k} := B_{j+k} \psi_{j+k,k}$ , obtém-se imediatamente  $B_j = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{j-1} b_{j-k,k}$  e, portanto, a equação de fragmentação binária tem o membro direito dado por

$$Q_f(c)(j) := -\frac{1}{2} \sum_{k=1}^{j-1} b_{j-k,k} c_j + \sum_{k=1}^{\infty} b_{j,k} c_{j+k} \quad (14)$$

Analogamente ao que acontece nas equações de Smoluchowski, as versões contínuas das equações de fragmentação consistem em equações integro-diferenciais que se obtêm, formalmente, substituído os somatórios por correspondentes integrais.

O mecanismo de destruição dos diferentes agregados é traduzido matematicamente nas propriedades assumidas para as funções  $B(x)$ ,  $\psi(x, y)$  e  $b(x, y)$ . A única propriedade matemática geral a que todos os tipos de coeficientes têm de obedecer é a não negatividade:  $B(x) \geq 0$ ,  $\psi(x, y) \geq 0$  e  $b(x, y) \geq 0$ . Os coeficientes de fragmentação binária têm também de obedecer à restrição de simetria  $b(x, y) = b(y, x)$ .

Na literatura matemática não é invulgar trabalhar-se com condições gerais sobre o crescimento/decrescimento dos coeficientes de fragmentação binária, do tipo  $b(x, y) \leq (x+y)^\gamma$ , ou  $b(x, y) \leq x^\gamma + y^\gamma$ , ou  $b(x, y) \geq (x+y)^\gamma$ , etc, ou com condições ligeiramente mais gerais, menos explícitas, como sejam as designadas por *fragmentação forte* [27, 38] ou *fraca* [25, 26, 29, 41] (cf., e.g., as condições usadas no Teorema 8.)

Uma condição particularmente importante do ponto de vista físico, correspondente à ocorrência de reversibilidade microscópica nos sistemas em consideração, é a hipótese designada usualmente por condição de balanço detalhado. Esta condição

<sup>2</sup>O que é, obviamente, o que deveria ser, já que a fragmentação é binária...

pressupõe que ocorram simultaneamente fragmentação e coagulação (cf. secção seguinte) e, heurísticamente, afirma que existe um equilíbrio (i.e., uma solução independente do tempo) para cada uma das reacções individuais

$$(j) + (k) \rightleftharpoons (j + k).$$

A condição de balanço detalhado, na sua versão discreta, é a seguinte: existe uma sucessão positiva  $(M_j)$ , com  $M_1 = 1$  e tal que

$$a_{j,k}M_jM_k = b_{j,k}M_{j+k}. \quad (15)$$

A sucessão  $(M_j)$  é fisicamente interpretada como a função de partição do sistema [11, 29].

### 1.5 As equações de coagulação-fragmentação

As equações de coagulação-fragmentação são o sistema que se obtém quando temos presentes simultaneamente os fenómenos que foram considerados separadamente nas secções anteriores, tomando, portanto, a forma

$$\dot{c}_j = Q_c(c)(j) + Q_f(c)(j), \quad (16)$$

ou então

$$\partial_t c(t, x) = Q_c(c)(x) + Q_f(c)(x), \quad (17)$$

consoante se considerem as versões discreta ou contínua, respectivamente.

Possivelmente a primeira referência explícita na literatura a este tipo de equações é o artigo [20] sobre a modelação de fenómenos de polimerização e despolimerização em química. Os autores consideram a versão discreta dos processos, fragmentação binária e coeficientes de reacção independentes do tamanho dos agregados,  $a_{j,k} \equiv a$ ,  $b_{j,k} \equiv b$ .

O primeiro estudo matemático de existência de soluções de sistemas de coagulação-fragmentação é o trabalho de 1957 de Melzak a que já nos referimos na secção anterior, [132], o qual considera a equação para uma distribuição contínua de massas e os coeficientes de reacção limitados. A extensão a sistemas com coeficientes ilimitados foi iniciada mais de três décadas depois, nos trabalhos de Iain Stewart [172, 173]. Do ponto de vista de propriedades qualitativas de soluções, o primeiro estudo, também no contexto de sistemas contínuos e com coeficientes cinéticos constantes, foi publicado em 1979 por Michael Aizenman e Thor Bak em [1]. Para o sistema discreto, as primeiras contribuições matemáticas são um pouco mais tardias: aparentemente o primeiro resultado sobre existência de soluções deve-se a John Spouge [169] e foi publicado em 1984. Este resultado requer que os coeficientes de fragmentação sejam limitados, restrição que foi posteriormente levantada por John Ball e Jack Carr [10], e pelo autor [38], entre outros. Resultados análogos, para um sistema de coagulação semelhante obtido no âmbito da modelação da dinâmica de Glauber do sistema de Ising, foi estudado por Markus Kreer em [96]. O conhecimento

do comportamento assintótico de soluções encontra-se actualmente ainda algo incompleto. Os muitos e importantes desenvolvimentos que têm ocorrido ao longo da última década na compreensão do comportamento assintótico das soluções dos sistemas de coagulação-fragmentação devem muito aos métodos e abordagens desenvolvidos inicialmente nos contextos das equações Smoluchowski e de Becker-Döring. Parte destes trabalhos serão analisados mais adiante neste trabalho.

A maioria dos estudos matemáticos publicados têm-se debruçado sobre sistemas com fragmentação binária, mas alguns outros tipos de fragmentação têm, recentemente, sido alvo da atenção da comunidade matemática [71, 72, 73, 116, 177] e referir-nos-emos a eles na secção 1.7.

## 1.6 As equações de Becker-Döring

O modelo original foi proposto por Becker e Döring em 1935 [15] no contexto da modelação do processo de nucleação de uma nova fase num dado meio (gotículas líquidas num vapor sobresaturado, gotículas líquidas num sólido cristalino, ou precipitados sólidos num líquido), no qual a concentração de agregados de grande tamanho é de tal modo baixa que colisões entre eles podem ser desprezadas, sendo apenas relevantes as reacções entre os agregados e as partículas monoméricas. Ainda que neste contexto muito particular, não é fisicamente expectável que as equações de Becker-Döring constituam uma boa aproximação, mesmo a baixas densidades [147], dos fenómenos reais de nucleação. No entanto, a riqueza (e dificuldade) matemática das equações de Becker-Döring aliadas ao facto de que algumas das propriedades das suas soluções serem provavelmente ainda válidas para sistemas mais gerais (e cujo tratamento matemático é consideravelmente mais complexo) tornaram este sistema num caso paradigmático dos estudos de coagulação-fragmentação, cuja importância e cuja contribuição para a compreensão de outros sistemas mais gerais só muito dificilmente poderá ser sobrevalorizada [165]. Mesmo do ponto de vista físico e de modelação, sistemas do tipo Becker-Döring continuam a ser actualmente propostos e estudados na literatura [60, 89].

Na versão original das equações de Becker-Döring a concentração de monómeros era suposta constante no tempo. Deve-se a Burton [24] e a Penrose e Lebowitz [147] a reformulação das equações de Becker-Döring para a versão correntemente utilizada, na qual a massa do sistema é, formalmente, constante (e portanto a concentração de monómeros terá de ser dependente do tempo). Nesta versão, as equações de Becker-Döring são um caso particular das de coagulação-fragmentação discretas quando os coeficientes de coagulação e de fragmentação (binária) satisfazem a restrição<sup>3</sup>

$$a_{j,k} = b_{j,k} = 0 \quad \text{se } j \wedge k > 1. \quad (18)$$

Esta condição traduz, fisicamente, a hipótese dos agregados só poderem mudar de tamanho ganhando ou perdendo uma partícula (um monómero) de cada vez, como no esquema da Figura 3.

---

<sup>3</sup>Neste trabalho utilizaremos as notações  $x \wedge y = \min\{x, y\}$  e  $x \vee y = \max\{x, y\}$  e analogamente para comparações de mais de dois números.

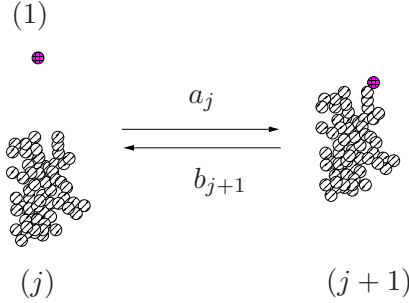


Figura 3: Esquema dos processos envolvidos nos sistemas de Becker-Döring.

A notação utilizada na escrita do sistema de Becker-Döring é, por razões históricas, ligeiramente diferente da que seria obtida por substituição de (18) em (4),(14) e do resultado em (16). O que é tradicionalmente utilizado é o seguinte: defina-se, para  $j > 1$ , os coeficientes  $a_j := a_{j,1}$  e  $b_{j+1} := b_{j+1,1}$ . Além disto, sejam  $a_1 = \frac{1}{2}a_{1,1}$ ,  $b_2 = \frac{1}{2}b_{2,1}$ , e lembre-se que os coeficientes cinéticos  $a_{j,k}$  e  $b_{j,k}$  são invariantes para a permuta dos índices. Assim, o sistema de Becker-Döring é usualmente escrito como

$$\begin{cases} \dot{c}_1 = -J_1(c) - \sum_{j=1}^{\infty} J_j(c), \\ \dot{c}_j = J_{j-1}(c) - J_j(c), \quad j \geq 2, \end{cases} \quad (19)$$

onde  $J_j(c) := a_j c_1 c_j - b_{j+1} c_{j+1}$ .

### 1.7 As equações de coagulação-fragmentação com fragmentação não-linear

Os processos de fragmentação referidos nos pontos anteriores são processos que poderíamos classificar como de fragmentação espontânea, no sentido em que um determinado aglomerado sofre uma fragmentação que, de um ponto de vista cinético, não depende da presença de quaisquer outras partículas no sistema, resultando, portanto, numa contribuição linear para as equações cinéticas (cf. seções 1.4 a 1.6).

Há, no entanto, situações em que outros mecanismos de fragmentação, resultando em contribuições não-lineares, são importantes. Uma dessas situações ocorre em astrofísica e em ciências atmosféricas [156, 170, 171] e tem recebido alguma atenção na literatura não-matemática (ver, por exemplo, [36, 63, 175, 184]). Considerando, para fins ilustrativos, apenas o caso de massas discretas, o processo em causa, designado por fragmentação colisional, consiste na fragmentação instantânea (na escala de tempos do problema) de um aglomerado formado pela colisão de dois aglomerados existentes no sistema. Assim, da colisão entre um  $k$ -aglomerado e um  $j - k$ -aglomerado pode resultar, com probabilidade  $w_{j-k,k}$ , um  $j$ -aglomerado, ou,

com probabilidade  $1 - w_{j-k,k}$ , um número variável de partículas-filha, cuja massa total terá de ser igual a  $j$ . Esquemáticamente tem-se, com  $j \geq i + 1$  e  $1 \leq k \leq j - 1$ ,

$$(j - k) + (k) \rightarrow (i) + \dots$$

Note-se que, ao invés do que acontece na fragmentação expontânea, a fragmentação colisional permite a produção de (alguns) aglomerados maiores que qualquer dos que inicialmente colidiram. As equações de coagulação-fragmentação correspondentes a este novo processo de fragmentação serão, tal como anteriormente, do tipo

$$\dot{c}_i = Q_d(c)(i) \quad (20)$$

e o termo de reacção no membro direito tem as seguintes contribuições:

1. a formação de  $i$ -aglomerados por colisão de dois aglomerados menores de tamanho apropriado, digamos  $i - j$  e  $j$ , e não destruição do aglomerado resultante, com probabilidade  $w_{i-j,j}$ , a que corresponde a parcela

$$\frac{1}{2} \sum_{j=1}^{i-1} w_{i-j,j} a_{i-j,j} c_{i-j} c_j \quad (21)$$

2. a destruição de  $i$ -aglomerados pela sua colisão com outro qualquer aglomerado presente no sistema, independentemente do resultado final da colisão, correspondendo ao termo  $Q_2(c)(i)$  dado por (3)
3. a formação de um  $i$ -aglomerado como resultado da colisão seguida de fragmentação instantânea, com uma probabilidade complementar da considerada na contribuição 1 apresentada acima, a que corresponde a parcela

$$\frac{1}{2} \sum_{j=i+1}^{\infty} \sum_{k=1}^{j-1} \Psi_{j-k,k}^i (1 - w_{j-k,k}) a_{j-k,k} c_{j-k} c_k, \quad (22)$$

onde  $\Psi_{j-k,k}^i$  fornece a distribuição dos fragmentos de tamanho  $i$  produzidos pela fragmentação colisional dos aglomerados de tamanho  $j - k$  e  $k$ . Esta função é, assim, análoga à função  $\psi$  que surge na modelação da fragmentação expontânea (cf. secção 1.4). Observe-se que  $\Psi$  tem de satisfazer a igualdade  $\Psi_{j,k}^i = \Psi_{k,j}^i$  e, considerando que cada reacção conserva a massa, também a seguinte expressão, semelhante a (9),

$$\sum_{i=1}^{j+k-1} i \Psi_{j,k}^i = j + k.$$

A especificação das funções  $\Psi$ ,  $w_{j,k}$  e  $a_{j,k}$  permite modelar as diferentes situações particulares de interesse, como, por exemplo, a considerada em [171] onde a fragmentação colisional produz sempre só monómeros.

Com estas hipóteses, a equação (20) virá

$$\begin{aligned} \dot{c}_i &= \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{i-1} w_{i-j,j} a_{i-j,j} c_{i-j} c_j - c_i \sum_{j=1}^{\infty} a_{i,j} c_j + \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{j=i+1}^{\infty} \sum_{k=1}^{j-1} \Psi_{j-k,k}^i (1 - w_{j-k,k}) a_{j-k,k} c_{j-k} c_k. \end{aligned}$$

É claro que ao membro direito deste sistema pode ser adicionado o termo de fragmentação espontânea  $Q_f(c)(i)$  dado por (13).

O primeiro trabalho matemático sobre esta equação é bastante recente e deve-se a Philippe Laurençot e Dariusz Wrzosek [116]. Um sistema (contínuo) muito semelhante a este mas em que existe uma limitação fixa no tamanho do maior aglomerado presente no sistema, foi recentemente proposto e estudado por Antonio Fasano e colaboradores no contexto da modelação de dispersões líquido-líquido em engenharia química [71, 72, 73] (veja-se também [177]). Um outro sistema semelhante foi proposto no âmbito da cinética das reacções de polimerização com fragmentação catalizada [92].

## 1.8 As equações de coagulação-fragmentação com termos difusivos

As abordagens aos processos de coagulação-fragmentação que referimos até agora presumem que os sistemas são espacialmente homogêneos e, portanto, as densidades em causa são independentes da localização espacial. No entanto, a consideração da dependência espacial das concentrações dos diversos agregados e, em particular, a inclusão de contribuições difusivas nas equações dos sistemas de coagulação-fragmentação é, desde há muito, tida como relevante em várias situações [19, 57, 143].

As versões discretas destes sistemas podem escrever-se como

$$\dot{c}_j = \nabla_z (d_j \nabla_z c_j) + Q_c(c)(j) + Q_f(c)(j), \quad \text{em } \Omega \times \mathbb{R}^+ \subseteq \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^+ \quad (23)$$

onde os coeficientes de difusão  $d_j = d_j(z, c)$  são funções não negativas e são impostas condições convenientes na fronteira  $\partial\Omega$ , ou de decaimento no infinito, às concentrações dos  $j$ -aglomerados,  $c_j$ , que dependem agora também da variável espacial  $z \in \Omega$ .

O primeiro estudo matemático sobre algumas características destes sistemas deve-se a Marshall Slemrod [162], mas o primeiro resultado geral de existência e unicidade de soluções (para o caso de ausência de fragmentação,  $Q_f(c)(j) \equiv 0$ ) é de Philippe Bénilan e Dariusz Wrzosek [16]. Na última década um número crescente de artigos tem tomado por objecto de estudo sistemas do tipo (23), ou a sua versão contínua, procurando esclarecer as diversas questões que se colocam em torno da existência, unicidade e comportamento de soluções. Neste contexto, as contribuições de, entre outros, Amann, Laurençot, Mischler e Wrzosek são extremamente importantes (cf., por exemplo [3, 4, 5, 65, 99, 107, 110, 114, 115, 186, 187]).

No presente trabalho não nos iremos debruçar sobre estas questões.

### 1.9 Equações com termos de transporte e cinéticos

Uma outra forma de incluir contribuições espaciais foi primeiro considerada em estudos de ciências meteorológicas, nomeadamente nos modelos da dinâmica das nuvens [17, 119]. Trata-se da equação de coagulação com termos de transporte que modelam a convexão dos aglomerados numa determinada região do espaço, devida a um campo de velocidades dado. Ilustraremos com o caso estudado em [61, Capítulos 10 e 11]. Seja  $z \in \Omega \subseteq \mathbb{R}^3$  a variável espacial,  $v(z, t, x) \in \mathbb{R}^3$  a velocidade do  $x$ -aglomerado no instante  $t$  e posição  $z$  e  $r(z, t, x) \in \mathbb{R}$  a taxa de variação da concentração  $c(z, t, x)$  devida a fenómenos de condensação ou de evaporação das gotas de tamanho  $x$  na coordenada  $(z, t)$ . Assim, a equação proposta inicialmente por Levin e Sedunov e por Berry é

$$\partial_t c(z, t, x) + \partial_x (r(z, t, x)c(z, t, x)) + \nabla_z (v(z, t, x)c(z, t, x)) = Q_c(c)(t, x), \quad (24)$$

onde  $Q_c(c)$  é definido por (6) com as concentrações dependendo agora também da variável espacial  $z$ , mas os coeficientes de coagulação são dependentes apenas das massas em presença.

No modelo anterior, o campo de velocidades é um campo “exterior” no qual os diferentes aglomerados estão mergulhados. Em particular, os fenómenos de coagulação não são influenciados pelo campo de velocidades  $v$ . Um modelo semelhante mas com outro nível de detalhe consiste em considerar o próprio processo de coagulação dependente da velocidade local, ou seja, em considerar o campo de velocidades não como um campo exterior que transporta os aglomerados, mas essencialmente o campo que descreve as velocidades locais de cada aglomerado. Esta hipótese, análoga à abordagem da teoria cinética, foi primeiro considerada, no contexto de modelos com velocidades discretas, por Marshall Slemrod e colaboradores [164, 166] e foi mais recentemente estudada, no caso geral, por Escobedo, Laurençot e Mischler em [66], onde são obtidos resultados de existência global de soluções fracas e de convergência de soluções quando  $t \rightarrow \infty$ . Sendo  $c(z, t, x, p)$  a concentração dos  $x$ -aglomerados com momento linear  $p$ , na posição  $z$  e no instante  $t$ , o sistema considerado em [66] é, com  $v = p/x$ ,

$$\partial_t c + v \cdot \nabla_z c = Q_c(c), \quad (25)$$

sendo o termo de coagulação  $Q_c = Q_1 - Q_2$  é definido por

$$\begin{aligned} Q_1(c) &:= \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} \int_0^x a(y', y - y') c(\cdot, \cdot, y') c(\cdot, \cdot, y - y') dx' dp' \\ Q_2(c) &:= \int_{\mathbb{R}^3} \int_0^x a(y, y') c(\cdot, \cdot, y) c(\cdot, \cdot, y') dx' dp' \end{aligned}$$

onde  $y := (x, p) \in \mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}^3$ , etc.

Um problema semelhante, mas sem dependência espacial, foi considerado anteriormente por Baranger em [13] e Roquejoffre e Villedieu em [155] e um outro sistema análogo, também sem dependência espacial mas onde, para além das colisões binárias que resultam em coagulações, são incluídas colisões elásticas (operador de colisão de

Boltzmann) e colisões inelásticas (operador de colisão granular) entre os aglomerados, foi recentemente alvo da atenção de Nicolas Fournier e Stéphane Mischler [79, 80].

Como é natural esperar, a análise matemática deste tipo de problemas utiliza abordagens que estão intimamente ligadas às que foram desenvolvidas para o estudo da equação de Boltzmann e de outras equações da Teoria Cinética.

No presente trabalho não nos iremos mais debruçar sobre estes problemas.

## 1.10 Outros modelos

Diversos outros modelos têm sido considerados na literatura e nesta secção iremos apenas fornecer um muito breve conjunto de exemplos.

### 1.10.1 Modelos com aglomerados multi-indexados

Nos sistemas referidos acima nas secções 1.8 e 1.9 os aglomerados eram caracterizados não apenas pela sua massa ou volume, mas pela sua localização no espaço ou pelo seu momento linear, ou por ambas as características. No entanto, estas últimas propriedades físicas não são, de facto, propriedades intrínsecas dos aglomerados e, como tal, os índices, ou as variáveis, que as denotam não são, geralmente, encaradas como sendo do mesmo tipo que as que designam a respectiva massa ou volume.

Ao invés dos casos já referidos anteriormente, em algumas aplicações os aglomerados presentes necessitam ser caracterizados não apenas pela sua massa, ou volume, mas por um outro índice que descreva uma outra característica que seja relevante para o estudo.

Um dos casos mais óbvios em que tal situação inevitavelmente acontece é quando estamos em presença de duas espécies monoméricas, digamos  $A$  e  $B$ , sendo importante mantermos o conhecimento de que modo um dado aglomerado é composto, em termos das diferentes unidades monoméricas e não apenas da sua massa total. Assim, a caracterização do aglomerado, na situação mais simples, terá de ser feita por um índice vectorial  $(i_A, i_B)$  que nos informa de que o aglomerado em causa é constituído a partir de  $i_A$  unidades do monómero  $A$  e de  $i_B$  unidades do  $B$ . Esta abordagem foi utilizada em estudos cinéticos sobre a formação de micelas e de vesículas (cf. e.g. [53]) onde o seguinte sistema Becker-Döring bicomponente foi proposto:

$$\dot{c}_{i,j} = J_{i-1,j}^A(c) - J_{i,j}^A(c) + J_{i,j-1}^B(c) - J_{i,j}^B(c), \quad i, j \in \mathbb{N}^+ \setminus \{1\}.$$

com os termos de balanço microscópico relativos ao monómero de tipo  $A$  dados por  $J_{i,j}^A(c) := a_{i,j}c_{1,0}c_{i,j} - b_{i+1,j}c_{i+1,j}$  e os relativos ao monómero  $B$  dados por  $J_{i,j}^B(c) := \alpha_{i,j}c_{0,1}c_{i,j} - \beta_{i,j+1}c_{i,j+1}$ , e onde os diversos termos têm significados análogos aos dos termos homólogos da equação de Becker-Döring.

Outro caso semelhante é o considerado quando os aglomerados são constituídos por duas fases da mesma substância e há necessidade de ter em conta as quantidades presentes de cada uma delas. Um exemplo é fornecido pelo estudo sobre

coagulação/condensação apresentado em [150], onde se considera que cada partícula pode ter uma massa (contínua)  $x$ , da qual  $\alpha$  será a massa de uma das componentes (água líquida ou gelo), e, usando notação análoga à da secção 1.2, o operador de coagulação correspondente a (6) é

$$\begin{aligned} Q_c(c)(x, \alpha) &= \frac{1}{2} \int_0^x \int_0^\alpha a(x-y, \alpha-\beta; y, \beta) c(\cdot, x-y, \alpha-\beta) c(\cdot, y, \beta) dy d\beta - \\ &= -c(\cdot, x, \alpha) \int_0^\infty \int_0^\infty a(x, \beta; y, \beta) c(\cdot, y, \beta) dy d\beta. \end{aligned}$$

Um outro exemplo da modelação de fenómenos de coagulação fazendo uso de um índice vectorial  $(j, k)$  encontra-se em [182], onde cada aglomerado é caracterizado pela sua massa  $j$  e também por um índice  $k \leq j$  que descreve a forma do aglomerado, na medida em que ela pode ser traduzida pelo seu diâmetro. Um aglomerado pode, assim, para além das reacções de coagulação e de fragmentação usuais, sofrer “reacções” que consistem num mero rearranjo interno da sua geometria, como se pretende indicar na Figura 4.

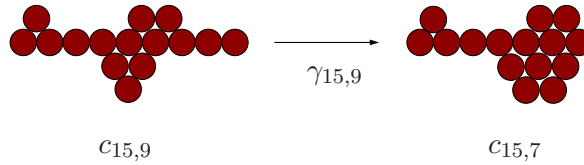


Figura 4: Ilustração de uma “reacção” de rearranjo geométrico interno de um aglomerado  $(15, 9)$  para um aglomerado  $(15, 7)$ , ocorrendo com taxa  $\gamma_{15,9}c_{15,9}$ .

Uma outra situação em que foi utilizada uma versão com índice vectorial das equações de coagulação-fragmentação foi na modelação do fenómeno de recobrimento das superfícies celulares ocasionada pela interacção célula-anticorpo (“surface capping”) [31, 52]. Neste contexto, um  $j$ -aglomerado pode ser representado por um grafo em que cada um dos  $j$  nós representa um monómero constituinte do aglomerado. Os nós são todos potencialmente trivalentes, mas nem todos têm todas as suas valências ocupadas. Os  $k < j$  nós com duas valências livres, os quais têm apenas uma aresta a ligá-los ao restante grafo (e correspondem, portanto, às folhas do grafo) são particularmente importantes para o modelo. Assim, os aglomerados têm de ser caracterizados pelo par  $(j, k)$  e o sistema que foi considerado na literatura foi uma versão adaptada das equações de Becker-Döring.

Por fim, uma outra situação, onde também o aglomerado é assimilado a um grafo (neste caso, uma árvore), foi tratada em [47] motivada pela abortagem em [84] do fenómeno da criticalidade auto-organizada. O modelo consiste num sistema de coagulação para a evolução de aglomerados indexados por um par  $(p, q)$ , onde  $p$  é a “ordem” e  $q$  a sua massa, e onde as reacções são esquematicamente representadas

por

$$(i, j) + (k, m) \rightarrow (\vee(i, k), (i \wedge k) + 1), j + m),$$

ou seja, a massa satisfaz a usual aditividade e a ordem satisfaz as regras de Horton-Strahler. Cada aglomerado é assimilado a uma aresta de uma árvore e uma reacção entre dois dados aglomerados corresponde às respectivas arestas concorrerem num vértice (cf. Figura 5).

O trabalho [47] estuda o sistema de coagulação para a evolução temporal das concentrações  $c_{i,j}$  dos aglomerados  $(i, j)$  e de quantidades mesoscópicas derivadas, como sejam o número total de aglomerados de uma determinada ordem.

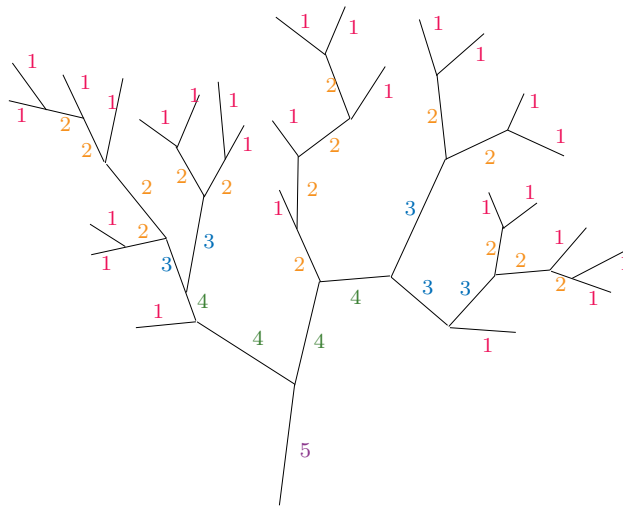


Figura 5: Ilustração das regras de Horton-Strahler para as ordens das arestas numa árvore.

### 1.10.2 Modelos de coagulação de intervalos

Os modelos que referiremos nesta secção constituem caricaturas do processo de maturação e envelhecimento em sistemas físicos longe do equilíbrio.

O primeiro destes modelos foi introduzido por Jack Carr e Robert Pego em 1992, no artigo [33], tendo como motivação o comportamento metaestável das soluções das equações de reacção-difusão do tipo Chafee-Infante,  $u_t = \varepsilon^2 u_{xx} + u - u^3$  num intervalo limitado  $(0, 1)$ , com condições de Neumann homogéneas na fronteira, o qual tinha sido descoberto e estudado escassos anos antes por esses mesmos autores e por Giorgio Fusco e Jack Hale numa série de notáveis artigos (cf. [32, 83] para um resumo desses resultados). Nestas equações ocorre um interessantíssimo fenómeno que consiste em as soluções se aproximarem de uma função que, não sendo um equilíbrio da equação, se mantém praticamente inalterada durante um intervalo de

tempo extraordinariamente longo (da ordem de  $e^{1/\varepsilon}$ ). O gráfico dessas soluções é essencialmente constante com a exceção do que se passa na vizinhança de um número finito  $N$  de pontos do intervalo  $(0, 1)$  onde ocorrem transições bruscas no valor da função. Quando duas dessas camadas de transição estão muito próximas uma da outra a dinâmica começa a acelerar muito apreciavelmente de modo que as camadas de transição bruscamente colapsam, após o que a dinâmica volta a se desenvolver numa escala de tempo exponencialmente longa. O modelo do tipo coagulação que foi proposto por Carr e Pego para este comportamento consiste no seguinte: considerem-se  $N \gg 1$  pontos arbitrariamente escolhidos no intervalo  $(0, 1)$  (esses pontos representam a localização das camadas de transição no modelo de reação-difusão). Assuma-se o seguinte processo em tempo discreto: em cada unidade de tempo determine-se o menor subintervalo da partição de  $(0, 1)$  gerada pelos  $N$  pontos escolhidos. Retirem-se os dois pontos que são a fronteira desse menor intervalo, de modo a que ocorra a fusão desse intervalo com os dois que o bordejam (isto corresponde ao colapso das camadas de transição) de modo que para a etapa seguinte existem agora  $N - 2$  pontos (cf. Figura 6).

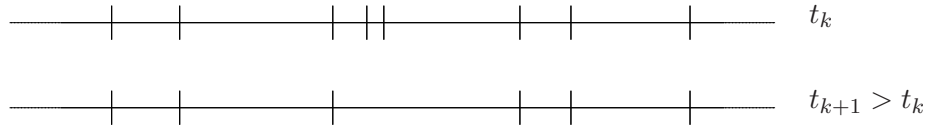


Figura 6: Ilustração do processo de coagulação de intervalos estudado em [33].

Se designarmos por  $f(x, t)$  a densidade, no instante  $t$ , da distribuição do número de subintervalos por unidade de comprimento, tem-se que o número total de intervalos por unidade de comprimento é

$$N(t) = \int_0^{\infty} f(x, t) dx.$$

Seja  $\mathcal{L}(t)$  o menor subintervalo no instante  $t$ . O processo descrito acima traduz-se agora nas seguintes duas contribuições para a equação diferencial de evolução da densidade  $f$ , a saber,

1. formação de um intervalo de comprimento  $x$  por coalescência de um intervalo de comprimento  $\mathcal{L}(t)$  com dois intervalos de comprimento  $y$  e  $x - y - \mathcal{L}(t)$
2. desaparecimento de um intervalo de tamanho  $x$  por coalescência com qualquer outro intervalo.

A equação diferencial para a variação da densidade é, então, a seguinte

$$\partial_t f(x, t) = N^{-2}(t) \left[ \int_0^{\infty} f(y, t) f(x - y - \mathcal{L}(t), t) dy - 2f(x, t) N(t) \right], \quad (26)$$

onde  $f(x, t) = 0$  se  $x < \mathcal{L}(t)$ , e, considerando o tempo numa escala tal que ocorre uma coagulação por unidade de comprimento e por unidade de tempo,  $f(\mathcal{L}(t), t) \frac{d\mathcal{L}}{dt} = 1$ .

O segundo modelo de coagulação de intervalos que referiremos nesta secção foi também proposto por Carr e Pego [34] e generaliza modelos anteriores propostos por Derrida, Godrèche e Yekutieli [55] e por Pesz e Rodgers [149]. A diferença relativamente ao modelo anterior é que agora,

1. em cada unidade de tempo, o menor intervalo da partição é dividido em  $\alpha^{-1}$  partes de acordo com uma densidade de probabilidade  $d\nu(\alpha)$  e essas partes são redistribuídas aleatoriamente pelos restantes intervalos da partição.

Seja  $X(t)$  o tamanho do menor intervalo no instante  $t$ ,  $\varphi(x, t)$  o número esperado de intervalos com comprimento maior ou igual a  $x$  no instante  $t$  dividido pelo número inicial total de intervalos, e  $N(t)$  o número total (dado) normalizado dos intervalos existentes no instante  $t$ . Então a equação que determina a dinâmica é

$$\partial_t \varphi(x, t) = -\frac{\dot{N}(t)}{N(t)} \int_0^\infty \left( \varphi(x - \alpha X(t), t) - \varphi(x, t) \right) \alpha^{-1} d\nu(\alpha)$$

sujeita à condição

$$N(t) = \varphi(x, t) \quad \text{para} \quad -\infty < x \leq X(t).$$

### 1.10.3 Modelos de proliferação em dinâmica de populações

Os estudos matemáticos dos processos de proliferação de populações biológicas, sejam populações de indivíduos, de células, ou de compostos bioquímicos, tem resultado na publicação de trabalhos sobre uma apreciável diversidade de equações diferenciais [148].

Uma dessas equações, que traduz a evolução temporal de uma população celular na qual ocorrem processos de mitose de células de tamanho  $x$  em duas de tamanho  $x/2$ , a uma taxa  $B(x)$ , é a seguinte [148, Capítulo 4]

$$\partial_t n(x, t) + \partial_x n(x, t) = -B(x)n(x, t) + 4B(2x)n(2x, t),$$

onde  $n(x, t)$  é a densidade de células de tamanho  $x$  no instante  $t$ . É possível generalizar este processo considerando a divisão das células em  $\alpha$  células filha com o mesmo tamanho  $x/\alpha$  [46]. Se estes processos de fragmentação celular permitem que as duas células filha sejam de tamanhos distintos, a equação diferencial para a densidade  $n(x, t)$  adquire uma forma que é a de uma equação de fragmentação com termo de transporte de massa [148] (cf. secções 1.4 e 1.9):

$$\partial_t n(x, t) + \partial_x n(x, t) = -B(x)n(x, t) + \int_x^\infty b(x, y)n(y, t)dy.$$

Para a modelação de situações mais específicas, os modelos matemáticos tornam-se correspondentemente mais complexos. A título de exemplo, um problema que

tem, recentemente, merecido bastante atenção é a modelação do crescimento e proliferação de populações priónicas (populações de priões, i.e., proteínas com conformações patológicas transmissíveis), responsáveis pelas encefalopatias espongiformes transmissíveis (das quais a mais conhecida será a popularmente chamada “doença das vacas loucas”) [85, 151] tendo já sido publicados trabalhos em que se procede à análise matemática rigorosa desses modelos [113, 160, 178]. Segundo a teoria biológica actualmente mais consensual, existem duas formas básicas de priões, uma forma normal, não-infecciosa, monomérica (designada por  $PrP^C$  na literatura) e uma forma infecciosa polimérica ( $PrP^{Sc}$ ) formada por polimerização dos monómeros. Acima de um tamanho crítico  $n$ , o  $PrP^{Sc}$  parece ser muito estável e tem uma forte tendência para se ligar rapidamente com os monómeros não-infecciosos. O  $PrP^{Sc}$  tem também a possibilidade de se cindir em polímeros abaixo do tamanho crítico  $n$ , os quais se degradam imediatamente em monómeros  $PrP^C$ . Designando por  $y_0(t)$  a concentração de monómeros  $PrP^C$  e por  $y_i$  a concentração do polímero  $PrP^{Sc}$  formado por  $i$  monómeros, o modelo matemático é o seguinte [85, 151]

$$\begin{cases} \dot{y}_0 &= \lambda - dy_0 - y_0 \sum_{i=n}^{\infty} \beta_i y_i + 2 \sum_{j=1}^{n-1} \sum_{i=n+j}^{\infty} j b_i y_i + 2 \sum_{j=1}^{n-1} \sum_{i=n}^{n+j-1} i b_i y_i \\ \dot{y}_i &= \beta_{i-1} y_0 y_{i-1} - \beta_i y_0 y_i - a_i y_i - (i-1) b_i y_i + 2 \sum_{j=i+1}^{\infty} b_j y_j, \end{cases}$$

onde  $a_i, b_i, \beta_i, \lambda$  e  $n$  são constantes positivas. Versões destas equações para massas contínuas dos polímeros  $PrP^{Sc}$  foram também consideradas na literatura [85, 113, 160, 178].

### 1.11 Outro tipo de questões envolvendo as equações de coagulação e de fragmentação

Para terminar esta parte introdutória referiremos brevemente um outro tipo de estudos matemáticos que envolvem as equações de coagulação e de fragmentação. Até aqui, os trabalhos matemáticos que referimos foram do tipo usualmente prosseguido em estudos de equações diferenciais, isto é, partindo de alguma das equações do tipo coagulação-fragmentação, estudar algumas das propriedades matemáticas das suas soluções. Será também este o género de estudos que analisaremos mais detalhadamente na segunda parte deste trabalho. No entanto, há um outro tipo de problemas matemáticos sobre estas equações que tem sido alvo de algum interesse recente da comunidade matemática: trata-se de, partindo de conceitos matemáticos e/ou físicos mais fundamentais, como sejam a física estatística de não-equilíbrio e as descrições de sistemas de muitas partículas em termos de processos estocásticos, obter as equações de coagulação como o limite hidrodinâmico desses processos. Não nos iremos debruçar sobre estes estudos, por serem de um interesse lateral para o restante trabalho, mas apresentaremos, de modo muito breve, qual o tipo de abordagem que é aí prosseguida. Para o esclarecimento das condições precisas de aplicabilidade, bem como de todos os pormenores técnicos envolvidos, deverão ser consultados os

artigos mais relevantes, nomeadamente os trabalhos de Flavius Guias [87], James Norris [140], Großkinsky e colaboradores [86], Vassili Kolokoltsov [95], Fraydoun Rezakhanlou [154], Nicolas Fournier e colaboradores [54, 77], entre outros. A descrição que se segue é adaptada de [154] e pretende ser meramente indicativa do tipo de abordagem.

O modelo microscópico considera, inicialmente, uma colecção de  $N \gg 1$  partículas distribuídas aleatoriamente em pontos  $x_i \in \mathbb{R}^d$ , com  $d \geq 2$  e  $i \in I = \{1, 2, \dots, N\}$ . Cada partícula tem uma massa inteira  $m_i \in \mathbb{N}^+$  e está animada de um movimento browniano com constante de difusão  $2d(m_i)$ . Quando duas partículas, de massas  $m_i$  e  $m_j$ , estão a uma distância mútua igual a  $\|x_i - x_j\| = \varepsilon > 0$  podem coagular formando uma partícula de massa  $m_i + m_j$ , localizada aleatoriamente em qualquer das posições  $x_i$  ou  $x_j$ , com probabilidade que depende das massas das partículas em presença<sup>4</sup>; este processo de coagulação resulta em que o número de partículas presentes no sistema varie (diminua) no tempo e, portanto, o conjunto que indexa as partículas é dependente do tempo,  $I_{q(t)} \subset I$ . Assume-se que a dinâmica deste sistema de partículas  $q(t) := \{(x_i(t), m_i(t)) | i \in I_{q(t)}\}$  é um processo de Markov com gerador infinitesimal  $\mathcal{L} = \mathcal{A}_{\text{dif}} + \mathcal{A}_c^\varepsilon$ , onde  $\mathcal{A}_{\text{dif}}$  é a contribuição do movimento browniano das partículas entre as colisões e  $\mathcal{A}_c^\varepsilon$  é o termo correspondente à coagulação. Para este processo microscópico define-se a medida empírica

$$g_n(dx, t) = \frac{1}{K_\varepsilon} \sum_i \delta_{x_i(t)}(dx) \mathbb{1}(m_i(t) = n).$$

Sendo  $K_\varepsilon \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} \infty$  um factor de re-escalamento apropriado e  $Z$  uma constante (a densidade macroscópica total), prova-se que no limite hidrodinâmico, isto é, quando  $N \rightarrow \infty$  mantendo-se  $N/K_\varepsilon = Z$ , a medida  $g_n(dx, t)$  converge para uma medida  $c_n(x, t)dx$  no seguinte sentido

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \mathbb{E}_N \left| \int_{\mathbb{R}^d} J(x, t) (g_n(dx, t) - c_n(x, t)dx) \right| = 0,$$

para qualquer função teste  $J$  limitada e contínua em  $\mathbb{R}^d \times [0, \infty)$ . A densidade  $c_n(x, t)$  da medida limite é solução da equação de coagulação com termos difusivos (23).

## 2 EXISTÊNCIA E UNICIDADE DE SOLUÇÕES DE SISTEMAS DISCRETOS DE COAGULAÇÃO-FRAGMENTAÇÃO

Nesta secção passaremos em revista os resultados sobre existência e unicidade de soluções de sistemas de coagulação-fragmentação, centrando-nos essencialmente

<sup>4</sup>Outras versões deste processo de coagulação de partículas estocásticas assumem que a partícula coagulada se localiza no centro de massa  $\frac{x_i m_i + x_j m_j}{m_i + m_j}$  das duas partículas originais [141], ou, ainda noutros estudos, a coagulação pode dar-se ao longo de uma gama alargada de distâncias entre as partículas, e não apenas à distância  $\varepsilon$  [86]

no caso do sistema discreto, Incluímos também o caso da equação de Smoluchowski, cujo estudo foi, não apenas historicamente anterior, como importante na medida em que permitiu o desenvolvimento de abordagens que se revelaram úteis para o caso geral de coagulação-fragmentação.

Centraremos a nossa atenção essencialmente em questões de existência, deixando os problemas de unicidade para a subsecção 2.5.

Antes de iniciarmos o estudo dos problemas de existência propriamente ditos, necessitamos de fazer uma breve referência aos espaços funcionais mais relevantes para esse estudo.

## 2.1 Espaços de densidades finitas

Com a notação introduzida na Secção 1.2, designaremos por  $c_j(t)$  a concentração do  $j$ -aglomerado no instante  $t$  e, sem perda de generalidade, consideraremos que o  $j$ -aglomerado tem massa discreta  $j$ . Assim, a quantidade  $\rho(t) := \sum_{j=1}^{\infty} j c_j(t)$  pode ser interpretada fisicamente como a densidade total do sistema (ou a sua massa total, assumindo que o volume é constante). Consequentemente, é razoável do ponto de vista físico impor que as soluções de (16) tenham de ter densidade finita, ou seja, para cada  $t \geq 0$ , devem pertencer ao espaço de Banach  $X_1 \subset \ell^1$  das sucessões de densidade finita definido por

$$X_1 := \left\{ c = (c_j) \in \mathbb{R}^{\mathbb{N}^+} : \|c\|_1 := \sum_{j=1}^{\infty} j |c_j| < \infty \right\}. \quad (27)$$

É importante em determinados contextos considerar a seguinte família de espaços de Banach

$$X_\alpha := \left\{ c = (c_j) \in \mathbb{R}^{\mathbb{N}^+} : \|c\|_\alpha := \sum_{j=1}^{\infty} j^\alpha |c_j| < \infty \right\}, \quad \alpha \geq 0. \quad (28)$$

Alguns destes espaços têm interpretações com significado físico, por exemplo, em  $X_0 = \ell^1$  a norma corresponde, do ponto de vista físico, a uma quantidade proporcional ao número total de aglomerados presente no sistema; também em  $X_2$  a norma tem um significado físico: é uma medida do tamanho médio dos aglomerados presentes no sistema. De facto, motivados pelo significado físico associado aos problemas de coagulação e de fragmentação, apenas serão relevantes as soluções que permaneçam no cone não negativo do espaço de trabalho  $X_\alpha$ , ou seja, em

$$X_\alpha^+ := \{c \in X_\alpha : c_j \geq 0, \forall j\}. \quad (29)$$

Não é difícil provar [37, Theorem 1.2.1] que os espaços  $X_\alpha$  com as normas  $\|\cdot\|_\alpha$  formam uma escala normal e compacta de espaços de Banach, ou seja, para todos os  $\beta > \alpha \geq 0$ ,  $X_\beta$  está contido em  $X_\alpha$  com injeção contínua, densa e compacta e,  $\forall c \in X_\beta$ , tem-se  $\|c\|_\alpha \leq \|c\|_\beta$ , sendo também válida a desigualdade de interpolação

$$\forall 0 \leq \alpha < \beta < \gamma, \quad \forall c \in X_\gamma, \quad \|c\|_\beta^{\gamma-\alpha} \leq \|c\|_\alpha^{\gamma-\beta} \|c\|_\gamma^{\beta-\alpha}.$$

Esta escala é também regular, i.e., a norma dos espaços duais  $X'_\alpha$  é uma função logaritmicamente convexa do parâmetro  $\alpha$ . Todavia, este resultado não parece ser útil para a análise das equações de coagulação-fragmentação.

Para a versão contínua das equações de coagulação-fragmentação (17), na qual as massas dos aglomerados estão em  $\mathbb{R}^+ = (0, \infty)$ , definem-se os correspondentes espaços de forma análoga; a única diferença a que é necessário atender é que agora o espaço das funções de densidade finita adequado é

$$Y_1 := L^1(\mathbb{R}^+, (1+y)dy) = L^1(\mathbb{R}^+, dy) \cap L^1(\mathbb{R}^+, ydy),$$

onde  $dy$  é a medida de Lebesgue em  $\mathbb{R}$ . A norma correspondente é

$$\|\cdot\|_{Y_1} := \|\cdot\|_{L^1(\mathbb{R}^+, dy)} + \|\cdot\|_{L^1(\mathbb{R}^+, ydy)}.$$

Esta diferença em relação ao caso discreto prende-se com o facto de não existir uma relação de inclusão entre os espaços  $L^p(\mathbb{R}^+)$  análoga à que existe nos  $\ell^p$ , do que resulta o facto de que uma função de  $L^1(\mathbb{R}^+, ydy)$  não seja necessariamente de  $L^1(\mathbb{R}^+, dy)$  o que cria diversos problemas matemáticos. Considerarmos uma condição inicial em  $L^1(\mathbb{R}^+, ydy)$  para a qual a norma de  $L^1(\mathbb{R}^+, dy)$  seja infinita pode ser interpretado do ponto de vista físico como correspondendo a um sistema no qual a densidade total é finita mas cujo número de partículas é infinito, i.e., heurísticamente, possui uma quantidade infinita de partículas de massa nula. Além das dificuldades matemáticas aludidas, esta situação não parece ser fisicamente de grande interesse.

## 2.2 Equações de Smoluchowski discretas

Consideremos, então, o problema de Cauchy para o sistema de coagulação de Smoluchowski (1)-(4),

$$\begin{cases} \dot{c}_j = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{j-1} a_{j-k,k} c_{j-k} c_k - c_j \sum_{k=1}^{\infty} a_{j,k} c_k \\ c_j(0) = c_{j0} \end{cases} \quad (30)$$

A abordagem aos problemas de existência de soluções de (30) que tem produzido melhores resultados consiste na aproximação de (30) por um sistema de dimensão finita  $n$ , na demonstração que as soluções deste,  $c^n(t)$ , se aproximam, em algum sentido, de uma função  $c(t)$  e que esta é solução do sistema de dimensão infinita (30). Esta abordagem foi utilizada desde os primeiros trabalhos matemáticos sobre este sistema, por McLeod [129], bem como sobre o sistema de coagulação-fragmentação, por Spouge [169] e de Becker-Döring, por Ball, Carr e Penrose [11].

Uma outra abordagem, que tem sido por vezes utilizada em sistemas de coagulação-fragmentação contínuos, consiste na utilização de teoremas de ponto fixo e de semigrupos de operadores, métodos que foram, nestes sistemas, primeiro utilizados por Melzak [132] e por Aizenman e Bak [1]. A abordagem baseada no estudo

do semigrupo gerado pelo sistema tem-se revelado muito útil no estudo de sistemas (lineares) de fragmentação (cf., por exemplo, [12, 128]) mas não parece ser a mais adequada ao estudo das equações com os termos não-lineares correspondentes à coagulação.

No presente trabalho iremos concentrar-nos unicamente na abordagem baseada na aproximação de (30) por sistemas de dimensão finita (truncaturas). Há essencialmente duas truncaturas de dimensão finita  $n$  que são utilizadas na literatura: a *n-truncatura maximal* e a *n-truncatura minimal*, na nomenclatura introduzida em [42]. A primeira destas corresponde a considerar o seguinte sistema de  $n$  equações diferenciais ordinárias para o vector de fase  $(c_1, c_2, \dots, c_n)$ :

$$\dot{c}_j = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{j-1} a_{j-k,k} c_{j-k} c_k - c_j \sum_{k=1}^{n-j} a_{j,k} c_j c_k, \quad j \in \{1, \dots, n\} \quad (31)$$

A segunda corresponde ao sistema

$$\dot{c}_j = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{j-1} a_{j-k,k} c_{j-k} c_k - \sum_{k=1}^n a_{j,k} c_j c_k, \quad j \in \{1, \dots, n\} \quad (32)$$

para o mesmo vector de fase. Uma truncatura  $2n$ -dimensional semelhante à  $n$ -truncatura minimal, na qual o vector de fase é o vector  $2n$ -dimensional  $(c_1, c_2, \dots, c_{2n})$ , é constituída pelo seguinte sistema [101]:

$$\begin{cases} \dot{c}_j = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{j-1} a_{j-k,k} c_{j-k} c_k - \sum_{k=1}^n a_{j,k} c_j c_k, & j \in \{1, \dots, n\} \\ \dot{c}_j = \frac{1}{2} \sum_{k=j-n}^n a_{j-k,k} c_{j-k} c_k, & j \in \{n+1, \dots, 2n\}. \end{cases} \quad (33)$$

O ponto de partida para grande parte dos estudos de existência de soluções destas equações consiste em considerar uma versão apropriada e matematicamente rigorosa da seguinte igualdade (meramente formal) a qual pode ser encarada como uma versão fraca da equação de coagulação (ou de uma sua truncatura):

$$\sum_{j=1}^{\infty} g_j c_j(t) - \sum_{j=1}^{\infty} g_j c_j(\tau) = \frac{1}{2} \int_{\tau}^t \sum_{j=1}^{\infty} \sum_{k=1}^{\infty} (g_{j+k} - g_j - g_k) a_{j,k} c_j(s) c_k(s) ds, \quad (34)$$

onde se assume  $0 \leq \tau \leq t$  e se considera que  $(g_j)$  é uma sucessão-teste não-negativa. A partir desta igualdade (ou, mais precisamente, duma sua versão rigorosa) extraem-se as estimativas *a priori* adequadas às demonstrações dos diversos resultados. De (34) pode-se imediatamente inferir que a única estimativa *a priori* que é natural esperar que seja válida em  $X_1^+$  é a limitação da densidade (que corresponde a  $g_j = j$ ) e que quanto mais rapidamente crescerem os coeficientes de coagulação  $a_{j,k}$  mais difícil de obter serão as necessárias estimativas, sendo natural esperar que, pelo

menos em alguns desses casos, tenha de ser necessário ter o controle de um momento de ordem superior  $M_p(c) := \sum_{j=1}^{\infty} j^p c_j(t)$ ,  $p > 1$  (cf. adiante).

Antes de nos debruçarmos sobre estes resultados, é indispensável precisar a definição de solução que utilizaremos [10, 101].

**Definição 1** *Seja  $T \in (0, +\infty]$  e  $c_0 = (c_{j0}) \in [0, +\infty)^{\mathbb{N}^+}$ . Uma solução  $c = (c_j)$  de (30) em  $[0, T)$  é uma sucessão de funções contínuas não-negativas satisfazendo,  $\forall j \geq 1$  e  $\forall t \in (0, T)$ ,*

(i)  $c_j \in \mathcal{C}([0, T))$

(ii)  $\sum_{j=1}^{\infty} a_{j,k} c_j \in L^1(0, t)$

(iii)  $c_j(t) = c_{j0} + \int_0^t \left( \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{j-1} a_{j-k,k} c_{j-k}(s) c_k(s) - \sum_{k=1}^{\infty} a_{j,k} c_j(s) c_k(s) \right) ds$

Observe-se que, com esta definição, estamos apenas interessados em soluções não-negativas, as quais são, de facto, as únicas fisicamente relevantes. Um problema que imediatamente se coloca é o de saber se, considerando condições iniciais  $c_0$  não-negativas, as soluções do sistema permanecerão sempre quer não-negativas, quer estritamente positivas. Esta questão foi investigada primeiro em [11] para o sistema de Becker-Döring e em [27] e [29] para sistemas de coagulação-fragmentação. Para as equações de Smoluchowski o seguinte resultado de positividade foi provado em [39]:

**Teorema 1** [39] *Seja  $a_{j,k} > 0$  para todos os  $j, k$ . Seja  $c_0 \in X_1^+$  e seja  $c$  uma solução de (30) em  $[0, T) \subset [0, +\infty)$ . Para cada  $t \in [0, T)$  seja  $\mathcal{J}(t)$  o conjunto dos índices  $j$  para os quais se tem  $c_j(t) > 0$ . Então  $\mathcal{J}(t) \equiv \mathcal{J}$  é independente de  $t$  e é dado por  $\mathcal{J} = \text{span}_{\mathbb{N}_0}(\mathcal{J}(0)) := \{j = \sum_i n_i p_i : p_i \in \mathcal{J}(0), n_i \in \mathbb{N}_0, \max_i n_i > 0\}$ .*

É imediato concluir daqui que se, para algum índice  $p$ , se tem  $c_p(0) > 0$  então será sempre  $c_p(t) > 0$  para todos os  $t > 0$ . Por outro lado, a demonstração do resultado implica que, se  $c_p(0) = 0$ , então, ou  $c_p(t) = 0, \forall t > 0$  (se  $p \notin \text{span}_{\mathbb{N}_0}(\mathcal{J}(0))$ ), ou então será sempre positiva (se  $p \in \text{span}_{\mathbb{N}_0}(\mathcal{J}(0))$ ).

O resultado de positividade dado por este teorema baseia-se na escrita da equação de Smoluchowski na forma

$$c_j(t) E_j(t) = c_j(\tau) E_j(\tau) + \int_{\tau}^t E_j(s) R_j(s) ds \quad (35)$$

onde

$$E_j(t) := \exp \left( \sum_{k=1}^{\infty} a_{j,k} c_k(t) \right) \quad \text{e} \quad R_j(t) := \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{j-1} a_{j-k,k} c_{j-k}(t) c_k(t),$$

e  $R_1(t) \equiv 0$ .

Estes resultados de positividade são também relevantes para os sistemas de coagulação-fragmentação, para os quais este método (com a alteração óbvia nas definições de  $E_j$  e  $R_j$ ) foi primeiro utilizado [27, 29], e onde permitiu provar que, para todo o  $t > 0$ , todas as componentes  $j$  das soluções  $(c_j(t))$  são estritamente positivas (i.e.,  $\mathcal{J} \equiv \mathbb{N}$ ) desde que, para todos os naturais  $k$ , os coeficientes  $a_{1,k}$  e  $b_{1,k}$  sejam positivos.

Os resultados sobre existência de solução dependem, naturalmente, do tipo de hipóteses que se faz sobre os coeficientes de coagulação  $a_{j,k}$ . Sobre este assunto, é interessante observar que não apenas o crescimento mas a própria estrutura dos coeficientes  $a_{j,k}$  é determinante para a existência, ou não, de solução, como fica claramente estabelecido nos resultados que apresentaremos de seguida.

Começemos por considerar os coeficientes de coagulação seguintes, que designaremos por *coeficientes de tipo multiplicativo*:

**(H1)** Existem sucessões não-negativas  $(r_j)$  e  $(\alpha_{j,k})$  tais que

$$a_{j,k} = r_j r_k + \alpha_{j,k} \quad (36)$$

e uma das duas seguintes condições são satisfeitas:

$$\lim_{j \rightarrow \infty} \frac{r_j}{j} = 0, \quad \lim_{j \rightarrow \infty} \frac{\alpha_{j,k}}{j} = 0, \quad \forall k \geq 1 \quad (37)$$

ou

$$\inf_{j \geq 1} \frac{r_j}{j} = R > 0, \quad \alpha_{j,k} \leq K r_j r_k, \quad \forall j, k \geq 1, \quad (38)$$

para constantes não-negativas  $R$  e  $K$ .

Para este tipo de coeficientes tem-se o seguinte resultado, devido a Laurençot [101], e a Leyvraz e Tschudi [123],

**Teorema 2** *Assumindo as hipóteses (H1) e sendo  $c_0 \in X_1^+$ , existe pelo menos uma solução  $c$  de (30) em  $[0, +\infty)$  tal que, para todos os  $t \in [0, +\infty)$ , se verifica  $c(t) \in X_1^+$  e  $\|c(t)\|_1 \leq \|c_0\|_1$ .*

*Esboço da demonstração:* A ideia básica da demonstração é a de, a partir de uma sucessão de soluções de sistemas  $n$ -truncados, obter, por passagem ao limite quando  $n \rightarrow \infty$ , uma função contínua não-negativa e provar que esta é, de facto, uma solução do problema de Cauchy para a equação de Smoluchowski (30).

Precisando um pouco mais esta ideia para o caso em que os coeficientes de coagulação satisfazem (37) tem-se o seguinte argumento devido a [123]. A existência de uma função  $c = (c_j)$ , limite da sucessão de soluções  $(c_j^N)$  de sistemas truncados (usando, por exemplo (31)) pode ser conseguida utilizando o teorema de Ascoli-Arzelà, via a injeção compacta de  $X_1$  em  $X_{(r)} := \left\{ c = (c_j) \in \mathbb{R}^{\mathbb{N}^+} : \|c\|_{(r)} < \infty \right\}$ ,

onde  $\|c\|_{(r)} := \sum_{j=1}^{\infty} r_j |c_j|$ , e a equilimitação e a equicontinuidade uniforme da sucessão. Um outro modo de obter a função limite da sucessão de soluções  $(c_j^N)$  deve-se a Ball e Carr [10] e consiste em aplicar o teorema de Helly [94, pp. 356-7] a uma sucessão de funções equilimitadas e de variação uniformemente limitada construída à custa das soluções  $(c_j^N)$ .

Sob a hipótese (37), a limitação uniforme *a priori* da densidade de  $(c_j^N)$  é suficientemente forte para nos permitir a seguinte estimativa uniforme (em  $N_k$ )

$$\sum_{i=M}^{N_k} r_i c_i^{N_k} \leq \sup_{i \geq M} \frac{r_i}{i} \sum_{i=M}^{N_k} i c_i^{N_k} \leq \|c_0\|_1 \sup_{i \geq M} \frac{r_i}{i} \quad (39)$$

a qual permite-nos controlar a soma infinita no membro direito de (31) e para obter o limite pontual

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \left| \sum_{j=1}^{N_k} a_{i,j} c_j^{N_k} - \sum_{j=1}^{\infty} a_{i,j} c_j \right| = 0, \quad (40)$$

o qual, pelo teorema da convergência dominada, permite passar ao limite e provar que  $c$  é uma solução do problema (30).

Se os coeficientes de coagulação satisfizerem (38) em vez de (37), o problema é algo mais difícil e o argumento tem de ser modificado. A dificuldade acrescida deste caso vem do facto de que a limitação uniforme da densidade de  $(c_j^N)$  não nos permite controlar os termos da soma infinita do membro direito do sistema truncado. A análise que se apresenta a seguir, e que permite ultrapassar esse problema, deve-se a Laurençot [101] e utiliza a truncatura (33).

A primeira parte da demonstração consiste em concluir sobre a existência de uma função  $c$ , limite da sucessão das soluções  $(c_j^N)$  dos sistemas truncados quando a dimensão  $N$  da truncatura tende para infinito. O resultado é consequência da injeção compacta de  $H^1(0, T)$  em  $\mathcal{C}(0, T)$ . Começemos por observar que a versão de (34) para soluções  $(c_j^N)$  de (33) é

$$\sum_{j=1}^{2N} g_j c_j^N(t) - \sum_{j=1}^{2N} g_j c_j^N(\tau) = \frac{1}{2} \int_{\tau}^t \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^N (g_{j+k} - g_j - g_k) a_{j,k} c_j^N(s) c_k^N(s) ds,$$

e é explorando esta equação para propagação dos  $g$ -momentos das soluções  $(c^N)$  dos sistemas truncados que permite obter as necessárias estimativas. Escolhendo sucessivamente  $g_j = j \mathbf{1}_{\{1, \dots, N\}}$ ,  $g_j = 1$ , e  $g_j = j^{1/2} \mathbf{1}_{\{1, \dots, N\}}$ , nesta identidade, pode-se concluir,

$$\sum_{j=1}^N j c_j^N(t) \leq \sum_{j=1}^N j c_j^N(\tau) \leq \sum_{j=1}^N j c_{j0} \quad (41)$$

$$\sum_{j=1}^{2N} c_j^N(t) + \frac{1}{2} \int_0^t \left| \sum_{j=1}^N r_j c_j^N(s) \right|^2 ds \leq \sum_{j=1}^{2N} c_{j0} \quad (42)$$

$$\int_{\tau}^t \left| \sum_{j=M}^N r_j c_j^N(s) \right|^2 ds \leq 4 \left( \sum_{j=1}^N j^{1/2} c_j^N(\tau) \right) M^{-1/2}. \quad (43)$$

Estas estimativas *a priori* permitem concluir que, para quaisquer  $T \in (0, +\infty)$  e  $N \geq j$ , se tem  $c_j^N(t) \leq \|c_0\|_0$  em  $[0, T]$  e

$$\left\| \frac{dc_j^N}{dt} \right\|_{L^2(0,T)} \leq T^{1/2} \left( \sum_{i=1}^{j-1} a_{i,j-i} \right) \|c_0\|_0^2 + \sqrt{2}(1+K)r_j \|c_0\|_0^{3/2}. \quad (44)$$

Consequentemente, a sucessão  $(c_j^N)$  é limitada em  $H^1(0, T)$  e, portanto, é relativamente compacta em  $\mathcal{C}(0, T)$ . Utilizando um argumento de diagonalização, pode-se concluir sobre a existência de uma subsucessão  $(c_j^{N_k})$  convergente em  $\mathcal{C}(0, T)$  para uma função  $c = (c_j)$  quando  $N_k \rightarrow \infty$ .

Esta convergência de  $(c_j^{N_k})$  para  $c$ , conjuntamente com as estimativas (41) e (43), permite deduzir a versão correspondente a (40) válida neste caso, a saber,

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \left\| \sum_{j=1}^{N_k} a_{i,j} c_j^{N_k} - \sum_{j=1}^{\infty} a_{i,j} c_j \right\|_{L^2(0,T)} = 0, \quad (45)$$

o que constitui o ingrediente principal que permite passar ao limite na  $i$ -ésima equação de (33), concluindo-se assim que  $c$  é solução de (30). ■

Consideraremos seguidamente coeficientes de coagulação de *tipo aditivo*, isto é, satisfazendo a condição seguinte:

**(H2)** Existem sucessões não-negativas  $(r_j)$  e  $(\alpha_{j,k})$  tais que

$$a_{j,k} = r_j + r_k + \alpha_{j,k}, \quad (46)$$

e ainda  $0 \leq \alpha_{j,k} \leq K(j+k)$ , para alguma constante  $K \geq 0$ .

Se as sucessões  $(r_j)$  e  $\alpha_{j,k}$  da hipótese anterior forem sub-lineares e satisfizerem (37), o argumento de Leyvraz e Tschudy apresentado acima pode ser facilmente adaptado para se obter existência também neste caso. Quando o crescimento de  $(r_j)$  puder ser linear,  $r_j \leq (\text{const.})j$ , é necessário modificar os argumentos anteriores: é ainda possível utilizar o teorema de Helly para garantir a existência de limite (de uma subsucessão) da sucessão das soluções dos problemas truncados, mas a restante demonstração necessita ser alterada, relativamente ao que foi apresentado acima, usando-se uma identidade análoga a (34) para a evolução das somas parciais  $\sum_{j=m}^N g_j c_j^N(t)$ . Esta abordagem, devida a Ball e Carr [10], permite tratar simultaneamente o sistema de coagulação-fragmentação e, portanto, deixaremos para a próxima secção uma descrição um pouco mais detalhada do argumento. O resultado que é possível provar é o seguinte

**Teorema 3** *Sendo  $K > 0$  uma constante e assumindo que  $a_{j,k} \leq K(j+k)$ , considere-se  $c_0 \in X_1^+$  arbitrário. Nestas condições existe pelo menos uma solução  $c$  de (30) em  $[0, +\infty)$  tal que, para todos os  $t \in [0, +\infty)$ , se verifica  $c(t) \in X_1^+$  e  $\|c(t)\|_1 \leq \|c_0\|_1$ .*

Uma distinção importante entre sistemas com coeficientes de coagulação multiplicativos e aditivos é que, em sistemas com coeficientes de tipo aditivo, não existem soluções do problema de Cauchy (30) se o crescimento dos coeficientes for sobre-linear, o que, pelo que vimos no Teorema 1, não se passa para coeficientes de tipo multiplicativo. Este resultado, algo surpreendente, de não existência de soluções é uma consequência dos seguintes dois teoremas, a que nos voltaremos a referir na Secção 4, onde estudaremos com maior detalhe as questões relacionadas com conservação da densidade de soluções.:

**Teorema 4** [10] *Considere-se a hipótese **(H2)** e seja  $c_0 \in X_1^+$ . Então, para qualquer  $T > 0$ , todas as soluções  $c$  de (30) em  $[0, T)$  satisfazem a conservação de densidade  $\|c(t)\|_1 = \|c_0\|_1$ .*

**Teorema 5** [28, 176] *Sejam  $C_L, C_U > 0$  e  $\beta \geq \alpha > 1$  constantes tais que  $C_L(j^\alpha + k^\alpha) \leq a_{j,k} \leq C_U(jk)^\beta$ . Seja  $c_0 \neq 0$  um elemento arbitrário de  $X_1^+$ . Então, qualquer solução de (30) em  $[0, T)$  não conserva densidade em qualquer intervalo  $[0, \tau)$ ,  $\forall \tau \leq T$ .*

É claro que os teoremas de existência poderão ser multiplicados indefinidamente se considerarmos outras classes de coeficientes de coagulação que não os de tipo multiplicativo, **(H1)**, ou aditivo, **(H2)**, mas para tais estudos serem de alguma relevância é necessário que os coeficientes considerados sejam, ou de enorme generalidade, ou de especial interesse para as aplicações. Nesta última classe situam-se, por exemplo, os coeficientes do tipo Becker-Döring (compare-se com a secção 1.6), ou seja, os que satisfazem

$$a_{j,k} = 0 \quad \text{se } j \wedge k > N,$$

onde  $N \geq 1$  é uma constante fixa. O caso clássico corresponde a  $N = 1$  [147] e é o único relevante nas aplicações (cf., e.g., [14]). Neste caso, os únicos coeficientes eventualmente não-nulos são os  $a_{j,1}$  ( $= a_{1,j}$ ) e o sistema de coagulação correspondente designa-se, por vezes, por “modelo de adição” (cf. [102]). Este modelo exibe um comportamento semelhante aos dos sistemas com coeficientes de tipo aditivo no que se refere à existência de soluções: o problema (30), com  $c_0 \in X_1^+$ , tem solução que conserva a densidade em qualquer intervalo  $[0, T)$  se  $a_{j,1} \sim \mathcal{O}(j)$ , [11], e, por outro lado, por argumentos análogos aos utilizados no caso de coeficientes de tipo aditivo, não possui solução em qualquer intervalo não degenerado se  $a_{j,1}$  for sobre-linear (satisfazendo condições algo técnicas mas pouco restritivas) [102]. Estes resultados são, na primeira situação, uma particularização do que é válido no sistema Becker-Döring com fragmentação (19) e, na segunda, um sub-produto da conservação da densidade implicada pela estrutura dos coeficientes [11]. Em qualquer dos casos, voltaremos a referir estas situações mais adiante no texto (Secções 2.3 e 3.1).

### 2.3 Equações de coagulação-fragmentação discretas

Centraremos agora a nossa atenção na questão da existência de solução dos problemas de Cauchy para os sistemas de coagulação-fragmentação discretas (16), os quais

re-escrevemos agora na seguinte notação:

$$\begin{cases} \dot{c}_j = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{j-1} W_{j-k,k}(c) - \sum_{k=1}^{\infty} W_{j,k}(c) \\ c_j(0) = c_{j0} \end{cases} \quad (47)$$

onde  $W_{j,k}(c) := a_{j,k}c_jc_k - b_{j,k}c_{j+k}$ .

A aproximação deste sistema por truncaturas de dimensão finita processa-se tal como no caso das equações de Smoluchowski tratadas na sub-secção anterior. Os sistemas truncados são análogos aos então considerados (31)-(33), consistindo a mudança, essencialmente, em substituir nessas equações, os termos do tipo  $a_{p,q}c_p c_q$  por  $W_{p,q}(c)$ . Com esta mesma alteração, e com a condição adicional  $\sum_{j=1}^{\infty} b_{j,k}c_j \in L^1(0, t)$ , obtém-se da Definição 1 a definição de solução aplicável aos sistemas de coagulação-fragmentação.

Como referimos na secção 1.5, o primeiro trabalho sobre este tipo de equações discretas deve-se Spouge [169], o qual considerou coeficientes de coagulação sublineares,  $a_{j,k} \leq r_j r_k$  com  $r_j \sim \mathcal{O}(j)$  quando  $j \rightarrow \infty$ , e condições relativamente restritivas nos coeficientes de fragmentação.

Resultados mais recentes, válidos para condições sobre os coeficientes bastante mais gerais, foram obtidos por Ball e Carr [10], da Costa [38] e Laurençot [104], e são sobre estes que nos iremos reter nesta parte. A técnica fundamental destes trabalhos é, tal como no caso dos sistemas de coagulação analisados na secção anterior, a exploração da evolução de  $g$ -momentos apropriados das soluções  $(c^N)$  dos sistemas  $N$ -truncados maximais a fim de se obterem as estimativas *a priori* que permitem proceder à passagem ao limite  $N \rightarrow \infty$ .

A versão de (34) para soluções  $(c_j^N)$  dos sistemas  $N$ -truncados maximais que será útil neste estudo é

$$\begin{aligned} \sum_{j=m}^N g_j c_j^N(t) - \sum_{j=m}^N g_j c_j^N(\tau) &= \int_{\tau}^t \left( \frac{1}{2} \sum_{T_{m,N}^1} (g_{j+k} - g_j - g_k) W_{j,k}(c) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} \sum_{T_{m,N}^2} g_{j+k} W_{j,k}(c) + \sum_{T_{m,N}^3} (g_{j+k} - g_k) W_{j,k}(c) \right) ds, \end{aligned} \quad (48)$$

onde os  $T_{m,N}^p$  são os seguintes subconjuntos de  $\mathbb{N} \times \mathbb{N}$ :  $T_{m,N}^1 := \{j, k \geq m, j+k \leq N\}$ ,  $T_{m,N}^2 := \{j, k \leq m-1, m \geq j+k \leq N\}$  e  $T_{m,N}^3 := \{j \leq m-1, k \geq m, j+k \leq N\}$ , sendo o somatório definido como zero se o correspondente conjunto for vazio.

Começamos por considerar o caso em que os coeficientes de coagulação não crescem demasiado rapidamente, sendo do tipo  $a_{j,k} \leq K(j+k)$ , para alguma constante positiva  $K$ . Esta condição cobre, obviamente, o caso em que  $a_{j,k} \leq (\text{const.})(jk)^{1/2}$ , mas não outros casos importantes nas aplicações, por exemplo  $a_{j,k} \leq (\text{const.})jk$ , que serão considerados posteriormente.

**Teorema 6** [10, 104] *Seja  $a_{j,k} \leq K(j+k)$ , onde  $K$  é uma constante positiva arbitrária. Seja  $c_0$  um elemento qualquer de  $X_1^+$ . Então, existe pelo menos uma solução  $c$  de (30) definida em  $[0, +\infty)$  e satisfazendo  $\|c(t)\|_1 = \|c_0\|_1$ .*

A demonstração original deste resultado é devida a Ball e Carr [10, Teoremas 2.4 e 2.5]. No que se segue apresentaremos uma versão mais simples, devida a Laurençot [104], que se baseia numa adaptação e generalização de um resultado clássico de de la Vallée Poussin [153, Theorem I.1.2-2] o qual, *grosso modo*, estabelece que qualquer função integrável possui uma propriedade de integrabilidade adicional (cf. Lema 1 abaixo). É com esta integrabilidade adicional que se consegue a estimativa *a priori* necessária para passar ao limite  $N \rightarrow \infty$  na sucessão das soluções  $(c^N)$  dos sistemas truncados.

Um aspecto notável destas demonstrações é que não necessitam de condições sobre os coeficientes de fragmentação  $b_{j,k}$  (para além da condição geral de positividade e simetria referida na Secção 1.4). O resultado de [104] é mesmo aplicável a equações com fragmentação múltipla (10)-(13), mas aqui particularizamos para o caso de fragmentação binária (47) que estamos a considerar.

*Esboço da demonstração:* A obtenção, a partir da sucessão das soluções  $(c^N)$  dos sistemas truncados, de uma função limite  $c$  com  $\|c\|_1 \leq \|c_0\|_1$ , candidata a ser a solução procurada do problema (47), pode ser feita, tal como se indicou no Teorema 2 acima, recorrendo à aplicação do teorema de Helly a uma sucessão auxiliar conveniente [10]. O problema fundamental é o de provar que esta função limite é a solução procurada e é sobre este que nos debruçaremos em seguida.

Seja  $\mathcal{K}_1$  a subconjunto de  $\mathcal{C}^1([0, +\infty)) \cap W_{\text{loc}}^{2,\infty}(0, +\infty)$  formado pelas funções  $U$  não negativas, convexas e que satisfazem  $U(0) = 0$ ,  $U'(0) \geq 0$  e  $U'$  é concava. Seja  $\mathcal{K}_{1,\infty} \subset \mathcal{K}_1$  constituído pelas funções que satisfazem

$$\lim_{x \rightarrow +\infty} U'(x) = \lim_{x \rightarrow +\infty} \frac{U(x)}{x} = +\infty. \quad (49)$$

A extensão de um resultado clássico de de la Vallée Poussin que é útil neste contexto é dada pelo seguinte lema:

**Lema 1** [100, 117] *Seja  $(\Omega, \mathcal{B}, \mu)$  um espaço de medida e seja  $w \in L^1(\Omega, \mathcal{B}, \mu)$ . Então, existe uma função  $U \in \mathcal{K}_{1,\infty}$  tal que  $U(|w|) \in L^1(\Omega, \mathcal{B}, \mu)$ .*

Na aplicação deste resultado ao presente caso considera-se  $\Omega = \mathbb{N}$ ,  $\mathcal{B} = 2^{\mathbb{N}}$  e, para  $I \in \mathcal{B}$ , define-se  $\mu(I) := \sum_{i \in I} c_{0j}$ , onde  $c_0 \in X_1^+$  é a condição inicial do problema de Cauchy (30). Como  $c_0 \in X_1^+$  tem-se  $(x \mapsto x) \in L^1(\Omega, \mathcal{B}, \mu)$  e, pelo Lema 1, existe uma função  $U_0 \in \mathcal{K}_{1,\infty}$  tal que  $(x \mapsto U_0(x)) \in L^1(\Omega, \mathcal{B}, \mu)$ , ou seja

$$\sum_{i=1}^{\infty} U_0(i)c_{0i} < \infty. \quad (50)$$

Observe-se que, no sentido de (49), a função  $U_0$  cresce mais rapidamente no infinito do que a identidade e, portanto, (50) fornece um decaimento adicional da condição

inicial  $c_0$ . Tal como no caso das equações de coagulação, a equação de propagação dos  $U$ -momentos das soluções ( $c^N$ ) dos sistemas truncados é fundamental para obter as estimativas necessárias. Para tal, e atendendo a (48), necessitamos de saber que, para qualquer  $U \in \mathcal{K}_1$ , existe uma constante positiva  $m_U$  tal que, para quaisquer  $i, j \in \mathbb{N}$ ,  $(i + j)(U(i + j) - U(i) - U(j)) \leq m_U(iU(j) + jU(i))$ . Aplicando esta desigualdade a (48) com  $m = 1$  e  $g = U_0$  obtem-se, para qualquer  $0 \leq t \leq T < +\infty$ ,

$$\sum_{j=1}^N U_0(j)c_j^N(t) \leq C(T) \quad (51)$$

$$0 \leq \int_0^T \sum_{i=1}^{N-1} i \sum_{j=i+1}^N \left( \frac{U_0(j)}{j} - \frac{U_0(i)}{i} \right) b_{i,j-i} c_j^N(s) ds \leq C(T), \quad (52)$$

onde  $C(T)$  representam constantes dependentes de (além de  $T$ )  $K$ ,  $c_0$  e  $U_0$ . As mesmas estimativas são válidas se efectuarmos a soma em (51) apenas até  $i \leq M$  e em (52) até  $i \leq M - 1$  e  $j \leq M$ , com  $M \leq N - 1$ . Passando ao limite primeiro quando  $N \rightarrow +\infty$  e depois quando  $M \rightarrow \infty$  podemos concluir que

$$\sum_{j=1}^{\infty} U_0(j)c_j(t) \leq C(T) \quad (53)$$

$$0 \leq \int_0^T \sum_{i=1}^{\infty} i \sum_{j=i+1}^{\infty} \left( \frac{U_0(j)}{j} - \frac{U_0(i)}{i} \right) b_{i,j-i} c_j(s) ds \leq C(T), \quad (54)$$

e daqui segue que  $\sum_{j=1}^{\infty} a_{i,j} c_j \in L^1(0, T)$  e  $\sum_{j=i+1}^{\infty} b_{i,j-i} c_j \in L^1(0, T)$ . De (51) deduz-se a seguinte estimativa, análoga a (39),

$$\sum_{j=M}^{N-i} a_{i,j} c_j^N \leq 2iK \sup_{j \geq M} \frac{j}{U_0(j)} \sum_{j=M}^{N-i} U_0(j) c_j^N \leq C(i, T) \sup_{j \geq M} \frac{j}{U_0(j)}, \quad (55)$$

a qual, conjuntamente com a estimativa análoga obtida a partir de (53) e com o teorema da convergência dominada de Lebesgue, permitem controlar o resto das séries correspondentes aos termos de coagulação e obter

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \left\| \sum_{j=1}^{N-i} a_{i,j} c_i^N c_j^N - \sum_{j=1}^{\infty} a_{i,j} c_i c_j \right\|_{L^1(0, T)} = 0. \quad (56)$$

O correspondente limite para os termos de fragmentação, a saber

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \left\| \sum_{j=i+1}^N b_{i,j-i} c_j^N - \sum_{j=i+1}^{\infty} b_{i,j-i} c_j \right\|_{L^1(0, T)} = 0, \quad (57)$$

resulta de (52), de (54) e do teorema da convergência dominada.

Isto permite concluir que a função  $c$ , limite da sucessão de truncaturas ( $c^N$ ) quando  $N \rightarrow \infty$ , é uma solução de (47).

Para se concluir que a norma de  $c$  é igual à norma da condição inicial utilizam-se novamente as estimativas (51) e (53) para escrever, com  $N \geq M - 1 \geq 2$  arbitrários,

$$\begin{aligned} \left| \|c(t)\|_1 - \|c_0\|_1 \right| &\leq \sum_{j=1}^{M-1} j|c_j^N(t) - c_j(t)| + \sum_{j=N+1}^{\infty} jc_{0j} + \sum_{j=M}^N jc_j^N(t) + \sum_{j=M}^{\infty} jc_j(t) \\ &\leq \sum_{j=1}^{M-1} j|c_j^N(t) - c_j(t)| + \sum_{j=N+1}^{\infty} jc_{0j} + 2C(T) \sup_{j \geq M} \frac{j}{U_0(j)}, \quad (58) \end{aligned}$$

o que, pela arbitrariedade de  $M$  e  $N$ , implica que  $\|c(t)\|_1 = \|c_0\|_1$ . ■

Se os coeficientes de coagulação não satisfizerem a estimativa do teorema 6, a saber  $a_{j,k} \leq K(j+k)$ , mas apenas a condição mais fraca  $a_{j,k} \leq K(jk)^\alpha$ , com  $\alpha \in [0, 1]$ , conhecem-se vários resultados de existência. Nestes casos, há, em geral, necessidade de impôr, além de condições sobre o crescimento de  $a_{j,k}$ , algumas restrições de estrutura sobre estes coeficientes, bem como restrições adicionais sobre os coeficientes de fragmentação.

Como referimos na página 32 um primeiro resultado deste tipo, devido a Spouge [169], é o seguinte (escrito com a hipótese de fragmentação binária)

**Teorema 7** [169] *Seja  $a_{j,k} \leq \mathcal{O}(j)\mathcal{O}(k)$ , quando  $j, k \rightarrow +\infty$  onde  $K$  é uma constante positiva arbitrária, e seja  $b_{j,k}$  tal que  $\sum_{k=1}^{j-1} b_{j,k} \leq Q$  e  $b_{j,k} \leq \mathcal{O}(k)$  quando  $k \rightarrow +\infty$ , para  $j$  fixo, onde  $Q > 0$  é uma constante. Seja  $c_0 \neq 0$  um elemento qualquer de  $X_1^+$ . Então, existe pelo menos uma solução  $c$  de (47) definida em  $[0, +\infty)$ .*

A demonstração deste resultado, tal como a do Teorema 2, envolve a utilização dos teoremas de Helly ou de Ascoli-Arzelà para, por passagem ao limite de uma sucessão de soluções de sistemas truncados, se obter uma solução do problema de Cauchy (47), [169].

Outro resultado de existência, este obtido em [38] com uma condições sobre os coeficientes de fragmentação aí designada por *fragmentação forte*, é o seguinte:

**Teorema 8** [38] *Seja  $a_{j,k} \leq K_a(jk)^\alpha$ , com  $K_a > 0$  e  $\alpha \leq 1$  constantes. Seja  $b_{j,k}$  tal que  $\sum_{j=1}^{\lfloor \frac{r-1}{2} \rfloor} j^\mu b_{j,r-j} \geq K_f(\mu)r^{\gamma+\mu}$ , onde  $\mu, \gamma$  e  $K_f(\mu)$  são constantes não-negativas e  $\gamma > \alpha$ . Seja  $c_0$  um elemento qualquer de  $X_1^+$ . Então, existe pelo menos uma solução  $c$  de (47) definida em  $[0, +\infty)$ . As soluções de (47) obtidas como limite se soluções se sistemas com truncatura maximal são únicas e satisfazem  $\|c(t)\|_1 = \|c_0\|_1, \forall t \geq 0$ .*

Observe-se que a condição de *fragmentação forte* utilizada neste teorema é satisfeita para coeficientes de fragmentação do tipo

$$b_{j,k} \sim (j+k)^\beta \quad \text{ou} \quad b_{j,k} \sim (jk)^\beta, \quad \text{com} \quad \beta > -1. \quad (59)$$

*Esboço da demonstração:* O ingrediente básico da demonstração é o efeito regularizador que a hipótese de fragmentação forte tem sobre momentos de ordem superior à primeira, facto que permite obter as estimativas *a priori* necessárias à passagem ao limite na sucessão de soluções dos problemas truncados. Este resultado de regularização consiste na integrabilidade local dos momentos  $\|c(\cdot)\|_{1+\gamma-\varepsilon}$ ,  $\forall \varepsilon$ , de funções  $c$  que podem ser obtidas como limites fracos-\* de sucessões de soluções dos sistemas truncados. Esta ideia já tinha sido utilizada previamente por Carr [27] no estudo sobre o comportamento assintótico de soluções quando os coeficientes de coagulação satisfaziam as condições do Teorma 6. As diferenças fundamentais relativamente ao que se passa em [27] residem em dois pontos: a desigualdade diferencial para os momentos de ordem superior das soluções  $c^N$  dos sistemas truncados é, neste caso,

$$\frac{d}{dt} \|c^N\|_\mu \leq \mathcal{C}_0 + \mathcal{C}_1 \|c^N\|_\mu^{\alpha_1} - \mathcal{C}_2 \|c^N\|_\mu^{\alpha_2}, \quad (60)$$

onde  $\mu \geq 1 + \alpha$ ,  $\alpha_1 = 1 + \frac{2\alpha-1}{\mu-1}$ ,  $\alpha_2 = 1 + \frac{\gamma}{\mu-1}$  e  $\mathcal{C}_j$  são constantes positivas dependentes apenas de  $\alpha, \gamma, \mu$  e  $\|c_0\|$ . Em [27], a desigualdade correspondente a (60) tem o membro direito que surge na equação de Bernoulli e, portanto, após uma mudança de variáveis apropriada pode ser resolvida explicitamente. No presente caso a análise de (60) é menos directa, mas consegue-se provar que  $\|c^N\|_\mu$  satisfaz a desigualdade

$$\|c^N\|_\mu \leq [(\nu - 1)At]^{-\frac{1}{\nu-1}}, \quad (61)$$

para constantes  $\nu \in (1, \alpha_2)$  qualquer e  $A = A(\nu, \alpha_1, \alpha_2, \mathcal{C}_0, \mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2) > 0$  convenientemente escolhida. De (61) obtém-se, por passagem ao limite  $N \rightarrow \infty$ , a integrabilidade local dos  $\mu$ -momentos ( $\mu < 1 + \gamma$ ) das funções que são obtidas como limites fracos-\* das soluções  $c^N$ . É esta integrabilidade local dos  $(1 + \gamma - \varepsilon)$ -momentos que constitui a estimativa *a priori* suficiente para, usando o teorema da convergência dominada e o teorema de Fatou-Lebesgue, passar ao limite na equação truncada, quer nos termos de coagulação, quer nos de fragmentação. ■

Para terminarmos esta secção, convém observar que os resultados aqui apresentados não cobrem todas as possíveis condições sobre os coeficientes de coagulação e de fragmentação. Note-se, em particular, que se os coeficientes de fragmentação decaíem mais rapidamente que o determinado pelas estimativas (59), os resultados apresentados acima não cobrem o caso em que  $a_{j,k} \sim \mathcal{O}(jk)$  (o Teorema 7, devido a Spouge, exige que  $a_{j,k} \sim \mathcal{O}(j)\mathcal{O}(k)$ ). A existência de solução num caso próximo deste tipo de crescimento crítico, em que os coeficientes de coagulação têm a estrutura  $a_{j,k} = j^\alpha k + k^\alpha j$ , com  $\alpha \in (0, 1)$ , foi obtida em [68], para sistemas de coagulação-fragmentação contínuos, como consequência das estimativas para o estudo do problema da gelificação. A análise apresentada nesse artigo pode ser aplicada no caso das equações discretas e será referida mais adiante, na Secção 4.

## 2.4 Sobre a unicidade de soluções

Tal como no caso da existência, resultados sobre unicidade de soluções têm sido obtidos sob diversas condições nos coeficientes de coagulação e de fragmentação.

A abordagem utilizada pelos diversos autores (cf. e.g. [11, 10, 38, 104]) é essencialmente a de supor que existem duas soluções distintas  $c$  e  $d$  para o problema de Cauchy (30) ou (47) e obter desigualdades diferenciais para algum momento do valor absoluto da função  $x := c - d$  que force a conclusão  $x \equiv 0$ .

O estabelecimento destas desigualdades diferenciais requer o conhecimento do comportamento de certos momentos da solução, o que requer a consideração de apenas certas classes de soluções, ou a imposição de condições de crescimento sobre os coeficientes cinéticos, em geral mais restritivas que o necessário para obter os resultados de existência. A fim de ilustrar esta afirmação analisaremos de seguida uma situação, estudada em [10], em que os coeficientes de coagulação são limitados, a qual contém já todos os ingredientes necessários para abordar casos mais gerais:

**Teorema 9** [10] *Seja  $a_{j,k} \leq K$  com  $K > 0$  constante. Seja  $c_0$  um elemento qualquer de  $X_1^+$ . Então, existe apenas uma solução  $c$  de (47) definida em  $[0, +\infty)$  e satisfazendo  $\|c(t)\|_1 = \|c_0\|_1$  para todo o  $t \geq 0$*

*Esboço da demonstração:* Suponha-se que existem duas soluções do problema de valores iniciais (47),  $c$  e  $d$ . Seja  $x := c - d$  e considere-se a função  $\psi_1(t) := \|x(t)\|_1$ . A versão de (34) com  $g_j = j\mathbf{1}(j \leq n)$  e com  $c$  substituída por  $|x|$  resulta em

$$\sum_{j=1}^n j|x_j(t)| = \int_0^t (U_n(s) + V_n(s)) ds, \quad (62)$$

onde

$$U_n := \frac{1}{2} \sum_{T_{1,n}^1} (f_{j+k} - f_j - f_k)(W_{j,k}(c) - W_{j,k}(d)), \quad V_n := - \sum_{T_{1,n}^4} f_j(W_{j,k}(c) - W_{j,k}(d)),$$

sendo  $f_j := j \operatorname{sgn}(x_j)$ ,  $T_{1,n}^4 := \{1 \leq j \leq n, j+k \geq n+1\}$  e  $T_{1,n}^1$  foi definido na página 32. Notando agora que  $W_{j,k}(c) - W_{j,k}(d) = (c_j x_k + d_k x_j) a_{j,k} - b_{j,k} x_{j+k}$  e tendo em conta que  $a_{j,k} \leq K$  conclui-se facilmente que  $\sum_{T_{1,n}^1} (f_{j+k} - f_j - f_k)(c_j x_k + d_k x_j) a_{j,k} \leq$

$\operatorname{const} \cdot \psi_1$  e portanto, como  $-(f_{j+k} - f_j - f_k) x_{j+k} \leq -((j+k) - j - k) |x_{j+k}| = 0$ , conclui-se que  $\int_0^t U_n(s) ds \leq \operatorname{const} \cdot \psi_1(t)$ . A estimativa  $\int_0^t V_n(s) ds \rightarrow 0$  quando  $n \rightarrow \infty$  é obtida à custa da condição sobre os coeficientes  $a_{j,k}$  e da hipótese de  $c$  e  $d$  conservarem a densidade, o que é natural, visto que esta última condição é equivalente a ter-se

$$\sum_{j=1}^n j c_j(t) - \sum_{j=1}^n j c_{j0} = - \int_0^t \sum_{T_{1,n}^4} j W_{j,k}(c(s)) ds \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0, \quad (63)$$

e analogamente para  $d$ . Estas estimativas permitem escrever

$$\psi_1(t) \leq \operatorname{const} \int_0^t \psi_1(s) ds, \quad (64)$$

e portanto, pela desigualdade de Gronwall, tem-se  $\psi_1 \equiv 0$ , ou seja, unicidade de soluções que conservam densidade. ■

Observe-se que no Teorema 9 impõe-se uma restrição muito forte sobre os coeficientes de coagulação mas não há restrições nos de fragmentação (para além das condições gerais de positividade e simetria). Note-se ainda que o resultado não afirma que há unicidade se soluções: apenas que há unicidade de soluções *na família das soluções que conservam a densidade*.

Este tipo de restrição ocorre também noutras circunstâncias. Em [38] prova-se que, sob as hipóteses consideradas no Teorema 8, existe unicidade de soluções que conservam densidade. A demonstração deste resultado é feita usando a mesma ideia que foi exposta acima. As estimativas necessárias para os integrais de  $U_n$  e de  $V_n$  são agora conseguidas recorrendo a um resultado de integrabilidade dos  $(1 + \alpha)$ -momentos das soluções  $c$  de (47),  $\|c(\cdot)\|_{1+\alpha} \in L^1(0, t)$ ,  $\forall t < \infty$ . Esta regularidade adicional, semelhante à que observámos na demonstração do Teorema 8 para funções que são limites fracos-\* das soluções dos sistemas truncados, tem primeiro que ser provada para quaisquer soluções de (47), não necessariamente por passagem ao limite de truncaturas, o que é conseguido por um processo análogo ao desenvolvido em [27]. As estimativas resultam na seguinte desigualdade, análoga a (64)

$$\psi_1(t) \leq \text{const} \int_0^t \varphi(s) \psi_1(s) ds, \quad (65)$$

onde  $\varphi(s) = K_a \|c(s)\|_{1+\alpha} + K_a \|d(s)\|_{1+\alpha}$ .

Outro resultado de unicidade semelhante ao apresentado no Teorema 9 encontra-se em [104] e complementa o resultado de existência que estudámos no Teorema 6. Com as condições  $a_{j,k} \leq A_j + A_k$ , onde  $A_i \leq K_a i$ , mostra-se, com uma demonstração análoga à apresentada acima, que existe unicidade de soluções que conservam densidade e que satisfazem a condição adicional de integrabilidade  $\sum_{j=1}^{\infty} j A_j c_j \in L^1(0, t)$ , para cada  $t < \infty$ .

É claro que uma questão que imediatamente se coloca é a de saber se existe, de facto, alguma solução com esta regularidade adicional, ou melhor, saber se existem condições que possam ser impostas nas condições iniciais e que garantam este tipo de regularidade. A resposta afirmativa a esta questão é dada pelo seguinte resultado, obtido por Laurençot em [104] e que generaliza resultados análogos, anteriores, de Carr e da Costa [29]. Antes de enunciar o resultado necessitamos introduzir a seguinte classe de funções: uma função  $U$  está em  $\mathcal{K}_2$  se for não-negativa, convexa, de classe  $\mathcal{C}^2([0, +\infty))$ , satisfazendo  $U(0) = U'(0) = 0$  e a sua derivada é convexa e satisfaz  $U'(2x) \leq K_U U'(x)$ , para alguma constante positiva  $K_U$  e para todos os  $x \geq 0$ . (As funções  $x \mapsto x^m$  estão em  $\mathcal{K}_2$  se  $m \geq 2$ .)

**Proposição 1** [104]  $a_{j,k} \leq K(j+k)$ , onde  $K$  é uma constante positiva arbitrária. Seja  $c_0$  um elemento qualquer de  $X_1^+$  tal que existe  $U \in \mathcal{K}_1 \cup \mathcal{K}_2$  para o qual

$\sum_{j=1}^{\infty} U(j)c_{j0} < \infty$ . Então, existe pelo menos uma solução  $c$  de (30) definida em  $[0, +\infty)$ , satisfazendo  $\|c(t)\|_1 = \|c_0\|_1$  e, para cada  $t < \infty$ ,

$$\sup_{s \in [0, t]} \sum_{j=1}^{\infty} U(j)c_j(s) < \infty.$$

Resultados deste tipo, usualmente designados por “propagação de momentos” são bastante úteis no estudo do comportamento assimpótico de soluções e teremos oportunidade de voltar a eles na póxima secção.

Restringindo as condições de crescimento dos coeficientes cinéticos é possível provar unicidade de soluções sem restrições de regularidade adicional. Um exemplo é o seguinte resultado, devido a Ball e Carr [10]:

**Teorema 10** [10] *Sejam  $K > 0$  e  $\alpha \in [0, \frac{1}{2}]$  constantes tais que, para quaisquer  $j, k, n_0$  naturais,  $a_{j,k} \leq K(jk)^\alpha$ ,  $\sum_{j=1}^{\lfloor (k+1)/2 \rfloor} j^{1-\alpha} b_{k-j,j} \leq Kk^{1-\alpha}$  e  $\sum_{j=n_0}^{\lfloor (r+1)/2 \rfloor} j^1 b_{r-j,j} \leq Kr$ , para  $r \geq 2n_0$ . Seja  $c_0$  um elemento qualquer de  $X_1^+$ . Então, para qualquer  $T > 0$  existe apenas uma solução  $c$  de (47) definida em  $[0, T)$ .*

Note-se que o Teorema 6 é aplicável a este caso, já que  $(jk)^\alpha \leq (jk)^{1/2} \leq \frac{1}{2}(j+k)$ , e isto implica que a única solução de (47) conserva densidade, mas observe-se que não se trata de unicidade no universo das soluções que conservam densidade (como no resultado de [38] referido acima) ou que têm alguma regularidade extra: aqui tem-se unicidade no universo de todas as soluções do problema de Cauchy (47). A demonstração deste teorema usa essencialmente o mesmo método que foi apresentado acima na demonstração do Teorema 9. A única diferença é que agora é mais conveniente obter estimativas sobre  $\psi_{1-\alpha}(t) := \|x(t)\|_{1-\alpha}$ , em vez de  $\psi_1(t) = \|x(t)\|_1$ . O resultado final, donde imediatamente se obtém a unicidade, é a desigualdade (64) com  $\psi_1$  substituído por  $\psi_{1-\alpha}$ .

Um problema que naturalmente se coloca é o de saber se os casos que não estão cobertos pelos teoremas de unicidade conhecidos correspondem, ou não, a autênticos casos de não unicidade de soluções. É claro que a elucidação desta questão corresponde a uma caracterização completa dos casos em que há unicidade e tal está por fazer. Conhecem-se, no entanto, exemplos de não unicidade que podem ser indicativos de que o problema não tem resposta simples. Para terminar esta secção iremos apresentar um exemplo de não unicidade obtidos por Ball e Carr em [10]. É muito curioso observar que este exemplo considera (47) apenas com termos de fragmentação, e portanto trata-se do comportamento de um sistema linear.

**Exemplo 1** [10] *Sejam  $a_{j,k} = 0$  e  $b_{j,k} = 1$ . Então, a função definida pela expressão  $c_j(t) := e^{-(j-1)t/2} (1 - e^{-t/2})^2$  é solução de (47) com condição inicial  $c_0 \equiv 0$ .*

Observe-se que as condições do Exemplo 1 são um caso particular das consideradas no Teorema 9. Portanto, sabemos que, nestas condições, as soluções as soluções

que conservam densidade são únicas. Como é óbvio que uma solução de (47) com condição inicial  $c_0 \equiv 0$  é a solução identicamente nula, o exemplo acima mostra que temos, de facto, não unicidade. Como nas condições do exemplo o sistema é linear, podemos obter, por combinações lineares, exemplos de não unicidade análogos a este para qualquer outra condição inicial.

### 3 COMPORTAMENTO ASSIMPTÓTICO DE SOLUÇÕES DE SISTEMAS DE COAGULAÇÃO-FRAGMENTAÇÃO

Iremos agora rever, de forma necessariamente breve, os mais importantes aspectos do comportamento assintótico de soluções para os quais possuímos resultados matematicamente rigorosos.

Nesta altura coloca-se com redobrada premência o problema da selecção dos tópicos a referir e da profundidade com que os mesmos serão abordados, pois a vastidão do tema levaria, muito facilmente, a que mesmo o modo breve como os resultados e as ideias das suas demonstrações foram abordados até aqui resultasse numa extensão do texto muito para além do limite razoável para um trabalho desta índole.

Este problema de selecção de tópicos já se colocou anteriormente e teve como resultado a focalização do nosso estudo nos sistemas discretos. Nesta parte do trabalho teremos de ser ainda mais restritivos: manteremos a mesma profundidade de abordagem anteriormente usada (discussão dos resultados e das ideias básicas envolvidas nas suas demonstrações) apenas nos assuntos para os quais fizemos alguma contribuição publicada, mas, relativamente a assuntos em cuja investigação não tivemos uma contribuição directa, iremos apenas discutir e enunciar os resultados, com as referências apropriadas, mas sem detalhar as ideias das demonstrações. Esta opção tem como resultado que a importância do resultado pode não estar convenientemente espelhada na extensão e profundidade que lhe é dedicada no texto, mas terá alguma justificação atendendo ao objectivo a que se destina o presente trabalho.

#### 3.1 Convergência para equilíbrios e transições de fase

Nesta secção concentrar-nos-emos nos resultados sobre convergência para equilíbrios de soluções de sistemas discretos de coagulação-fragmentação.

Atendendo a que, como vimos na Introdução, as equações de coagulação-fragmentação podem ser encaradas como um modelo matemático da cinética química de um sistema isolado de partículas, é natural esperar que o sistema convirja para algum equilíbrio quando  $t \rightarrow +\infty$ . De facto, se estivessemos perante um modelo usual da cinética química, em dimensão finita, seria exactamente isso que se passaria. Na presente secção iremos verificar que para os sistemas de coagulação-fragmentação (de dimensão infinita) o comportamento é bastante mais interessante e, até, surpreendente, podendo ocorrer um comportamento que pode ser fisicamente interpretado como uma transição de fase dinâmica.

### 3.1.1 Equações com fragmentação forte

Começamos por considerar o caso em que assumimos *fragmentação forte*. Este foi o caso analisado por Carr [27] e por Fournier e Mischler [78] e estas condições sobre os coeficientes de fragmentação foram também as utilizadas por da Costa no estudo de existência [38] analisado anteriormente (cf. Teorema 8).

A técnica subjacente aos resultados de Carr e de Fournier e Mischler baseia-se em, como referimos na discussão em torno do Teorema 8, as condições de fragmentação forte implicarem que momentos de ordem superior das soluções são finitos e positivamente limitados, o que implica a pré-compacidade da solução em  $X_1^+$  para a topologia da norma. A existência de uma função de Liapunov e a aplicação do princípio de invariância de LaSalle permitem a Carr a obtenção da convergência da solução para um único equilíbrio. Estimativas baseadas na regularidade de momentos de ordem superior permitem a Fournier e Mischler provar a convergência exponencial para um equilíbrio, desde que a densidade da condição inicial seja suficientemente pequena.

O resultado provado por Carr em [27] é o seguinte

**Teorema 11** [27] *Sejam  $K, K_f > 0$ ,  $\alpha \in [0, 1]$  e  $\gamma > \alpha$  constantes tais que, para quaisquer  $j, k$  naturais  $a_{j,k} \leq K(j^\alpha + k^\alpha)$ ,  $a_{1,k}, b_{1,k} > 0$  e  $\sum_{j=1}^{\lfloor \frac{r-1}{2} \rfloor} j^\mu b_{j,r-j} \geq K_f(\mu)r^{\gamma+\mu}$ . Suponha-se que é válida a condição de balanço detalhado (15) e que, para algum  $q \geq 1$ , a função de partição  $(M_j)$  satisfaz  $\liminf_{j \rightarrow \infty} M_j^{1/j^q} > 0$ . Seja  $\rho \geq 0$  arbitrário. Então, existe uma solução  $c^\rho$  das equações de coagulação-fragmentação, independente do tempo e com densidade  $\rho$ , tal que, para qualquer  $c_0$  em  $X_1^+$  com densidade  $\|c_0\| = \rho$ , a única solução  $c$  de (47) com densidade constante satisfaz  $\|c(t) - c^\rho\|_m \xrightarrow{t \rightarrow \infty} 0$ , qualquer que seja o  $m \geq 1$ .*

*Esboço da demonstração:* Com as condições sobre os coeficientes cinéticos assumidas neste teorema, os momentos das soluções  $c^N$  dos sistemas truncados satisfazem a seguinte desigualdade diferencial, análoga a (60),

$$\frac{d}{dt} \|c^N\|_\mu \leq \mathcal{C}_0 \|c^N\|_\mu - \mathcal{C}_1 \|c^N\|_\mu^{\alpha_2}, \quad (66)$$

onde  $\mu > 1$ ,  $\alpha_2 = 1 + \frac{\gamma}{m-1}$ ,  $\mathcal{C}_0$  e  $\mathcal{C}_1$  são constantes positivas. Sendo o membro direito desta desigualdade o mesmo que surge na equação de Bernoulli, a mudança de variáveis  $\|c^N\|_\mu \mapsto u := \|c^N\|_\mu^{1-\alpha_2}$  permite resolver explicitamente a desigualdade e, após passagem ao limite  $N \rightarrow \infty$ , obter a seguinte desigualdade para as soluções de (47) que são limites de sistemas truncados:

$$\|c\|_\mu \leq A (1 - e^{-Bt})^{-\frac{\mu-1}{\gamma}}, \quad (67)$$

onde  $\mu > 1$ ,  $A$  e  $B$  são constantes positivas.

A condição de fragmentação forte resulta também num resultado de integrabilidade dos  $(1 + \gamma - \varepsilon)$ -momentos de qualquer solução de (47), análogo ao referido

anteriormente (cf. página 38) e que tem também como resultado a unicidade de solução que conservam a densidade.

Este facto faz com que se possa definir o semigrupo de operadores  $T(\cdot)$  por  $T(\cdot)c_0 := c$ , onde  $c$  é a única solução de (47) que conserva a densidade. A desigualdade (67) permite concluir que, para cada  $\mu > 1$  e  $\tau > 0$ ,  $\cup_{t \geq \tau} T(t)c_0$  é um conjunto limitado de  $X_\mu$ , e portanto, pela injeção compacta entre os espaços  $X_\alpha$  (cf. página 24) é um conjunto pré-compacto de  $X_1^+$ .

Consequentemente, para cada condição inicial  $c_0 \in X_1^+$ , a solução  $T(t)c_0$  tem um  $\omega$ -limite  $\omega(c_0)$  não-vazio e invariante e  $\omega(c_0) \subset X_\mu$ , para qualquer  $\mu \geq 1$ . O problema que agora resta resolver para terminar a demonstração é caracterizar o conjunto  $\omega(c_0)$ , ou mais precisamente, mostrar que  $\omega(c_0)$  é constituído por um único equilíbrio, i.e., uma solução independente do tempo, com densidade  $\|\rho\| = c_0$  e que este  $\omega$ -limite é sempre o mesmo qualquer que seja a condição inicial com esta densidade  $\rho$ .

É neste ponto do argumento que é utilizada a condição de balanço detalhado. É também nesta etapa que a existência de uma função de Liapunov se revela crucial.

Considere-se, então, que é válida a condição do balanço detalhado (15). Para qualquer real  $d_1 \geq 0$  pode-se definir a sucessão  $d = (d_j)$  por

$$d_j := M_j (d_1)^j \quad (68)$$

e é óbvio que o balanço detalhado implica que

$$W_{j,k}(d) = a_{j,k}d_jd_k - b_{j,k}d_{j+k} = a_{j,k}M_jM_k(d_1)^{j+k} - b_{j,k}M_{j+k}(d_1)^{j+k} = 0,$$

pelo que  $d$  será uma solução estacionária de (47), com  $c_0 = d$ , se e só se  $d \in X_1^+$ . A positividade é óbvia por (68), mas a finitude da densidade de  $d$  requer um pouco mais de cuidado. Pretendendo estudar a densidade de  $d = (d_j) = (M_j(d_1)^j)$  é natural considerar-se a função  $z \mapsto F(z) : [0, +\infty) \rightarrow [0, +\infty]$  definida por

$$F(z) := \sum_{j=1}^{\infty} j M_j z^j. \quad (69)$$

Seja  $z_s \in [0, +\infty]$  o raio de convergência da série (69) e seja  $\rho_s := \sup_{z \in [0, z_s)} F(z)$ . Existem claramente três casos de  $z_s$  a considerar: se  $z_s = 0$  então  $\rho_s = 0$  e a única solução de equilíbrio é a solução nula; se  $z_s = +\infty$  então  $\rho_s = +\infty$  e para cada  $\rho \geq 0$  existe uma única solução de equilíbrio (68) com densidade  $\|d\|_1 = F(d_1)$ ; por último, se  $z_s \in (0, +\infty)$ , pode acontecer que  $\rho_s = +\infty$  ou  $\rho_s < +\infty$  e, neste último caso, não existirão equilíbrios com densidades  $\rho > \rho_s$ . Este último caso será importante na próxima secção, mas, com as condições de fragmentação forte que estamos presentemente a considerar, é possível provar que  $\rho_s = +\infty$ , pelo que, para qualquer  $\rho > 0$  existe um equilíbrio dado por (68) com densidade  $\rho$ , o qual designaremos por  $c^\rho$  [27].

A existência de uma função de Liapunov para sistemas de coagulação-fragmentação, relacionada fisicamente com a *energia livre* do sistema, parece ter sido identificada inicialmente, a nível formal, por Buhagiar para o sistema de Becker-Döring

(cf. ref. cit. [11]), e foi primeiro utilizada de modo matematicamente rigoroso por Aizenman e Bak no estudo do sistema contínuo com coeficientes constantes [1], e por Ball, Carr e Penrose para o sistema de Becker-Döring [11]. Com as presentes condições sobre os coeficientes a abordagem segue de perto este último estudo mas a limitação de momentos de ordem superior simplifica muito apreciavelmente a abordagem.

Para  $c \in X_1^+$ , considere-se a função

$$V(c) := \sum_{j=1}^{\infty} c_j \left( \log \frac{c_j}{M_j} - 1 \right), \quad (70)$$

onde o termo do somatório é assumido com sendo igual a zero se a componente  $c_j$  for nula.

As propriedades desta função, no que se refere à continuidade e a propriedades de minimização, foram essencialmente estabelecidas por Ball, Carr e Penrose em [11]. Podemos resumi-las de seguida:

Escreva-se  $V(c) = G(c) - F_m(c)$ , com

$$G(c) = \sum_{j=1}^{\infty} c_j (\log c_j - 1), \quad F_m(c) = \sum_{j=1}^{\infty} j^m c_j \log M_j^{1/j^m}. \quad (71)$$

Não é difícil provar que  $G$  toma valores finitos e é sequencialmente fracamente-\* contínua em  $X_1^+$ . Como o raio de convergência da série em (69) é positivo, tem-se  $\overline{\lim}_{j \rightarrow \infty} M_j^{1/j} < \infty$ . Conclui-se, então, que  $V$  é limitado inferiormente em

$$X_{1,\rho}^+ := \{c \in X_1^+ : \|c\|_1 = \rho\}; \quad (72)$$

$c^\rho$  é o único minimizante de  $V$  em  $X_{1,\rho}^+$  e qualquer sucessão minimizante  $(c^{(j)})$  de  $V$  em  $X_{1,\rho}^+$  converge para  $c^\rho$  fortemente em  $X_1$ . Se, para algum  $q \geq 1$ , se tem  $\underline{\lim}_{j \rightarrow \infty} M_j^{1/j^q} > 0$ , então  $V$  é limitada superiormente em  $X_m \cap X_{1,\rho}^+$  e é contínua neste conjunto se  $m \geq q$ .

Sendo  $(c^n)$  a solução do problema de Cauchy para o sistema de coagulação-fragmentação truncado com a truncatura maximal, é válida a igualdade

$$V(c^n(t)) + \int_{\tau}^t D_n(c^n(s)) ds = V(c^n(\tau)) \quad (73)$$

onde

$$D_N(c^n) := \frac{1}{2} \sum_{j+k \leq N} H_{j,k}(c^n) \quad (74)$$

e

$$\begin{aligned} H_{j,k}(c) &:= (a_{j,k} c_j c_k - b_{j,k} c_{j+k}) (\log(M_{j+k} c_j c_k) - \log(M_j M_k c_{j+k})) \\ &= (a_{j,k} c_j c_k - b_{j,k} c_{j+k}) (\log(a_{j,k} c_j c_k) - \log(b_{j,k} c_{j+k})) \\ &\geq 0, \end{aligned} \quad (75)$$

vindo a segunda igualdade da hipótese de balanço detalhado (15) e a positividade do facto das soluções terem todas as componentes positivas (cf. página 28) e da desigualdade  $(x - y)(\log x - \log y) \geq 0$ .

Como, para qualquer  $m \geq 1$ , tem-se  $c^n \rightarrow c$  fortemente em  $X_m^+$ , pela continuidade de  $V$  referida acima conclui-se que  $V(c^n(t)) \rightarrow V(c(t))$ , quaisquer que sejam  $t \geq \tau > 0$ . Fixando um natural  $N$  tem-se, para  $n \geq N$ ,  $D_n(c^n) \geq D_N(c^n)$  e portanto, para qualquer  $N$  natural,

$$\liminf_{n \rightarrow \infty} \int_{\tau}^t D_n(c^n(s)) ds \geq \int_{\tau}^t D_N(c(s)) ds$$

o que, passando ao limite  $N \rightarrow \infty$ , permite concluir que

$$V(c(t)) + \int_{\tau}^t D(c(s)) ds \leq V(c(\tau)), \quad (76)$$

onde

$$D(c) := \frac{1}{2} \sum_{j,k \geq 1} H_{j,k}(c), \quad (77)$$

o que conclui a demonstração que  $V$  é uma função de Liapunov para (47).

Com estes ingredientes é agora imediato provar que, nas condições do teorema, existe um e um só equilíbrio  $c^\rho$  com densidade  $\rho$  (o qual tem, necessariamente, a forma (68)), e obtém-se também imediatamente a caracterização de  $\omega(c_0)$ , já que este conjunto terá de consistir em soluções ao longo das quais a função de Liapunov é constante, o que, por (76) e pela conservação de densidade, permite concluir que  $\omega(c_0) = \{c^\rho\}$ , onde  $\rho = \|c_0\|$ , como se pretendia provar. ■

Como o ingrediente fundamental da demonstração é, como se referiu, a finitude de momentos de ordem superior, o Teorema 11 pode ser adaptado, sem dificuldades adicionais [43], às condições consideradas em [38], onde a condição sobre os coeficientes de coagulação é substituída por  $a_{j,k} \leq K(jk)^\alpha$ , com  $\alpha \leq 1$ .

Antes de terminarmos esta secção é interessante observar que a condição de balanço detalhado não é necessária para se obter convergência para um equilíbrio. De facto, em [78], Fourier e Mischler provaram que, se  $a_{j,k} \leq K_c(jk)^\alpha$  e  $L(j+k)^\gamma \leq b_{j,k} \leq K_f(j+k)^s$ , com  $\alpha \in [0, 1]$ ,  $\gamma > -2(1 - \alpha)$  e  $s, \gamma \in (-1, \infty)$ , então, para  $\rho = \|c_0\|$  suficientemente pequeno<sup>5</sup>, a solução  $T(t)c_0$  satisfaz

$$\|T(t)c_0 - \hat{c}\|_2 \leq K e^{-\kappa t}, \quad \forall t \geq 1, \quad (78)$$

onde  $K, \kappa > 0$  são constantes que dependem apenas de  $\alpha, \gamma, K_c, L$  e  $\rho$ , e  $\hat{c}$  é o único equilíbrio da equação de coagulação-fragmentação com densidade  $\rho$ . Note-se que este resultado estabelece também a convergência exponencial para o equilíbrio.

<sup>5</sup>A condição técnica precisa usada em [79], possivelmente não necessária, é que  $\rho$  satisfaça a desigualdade

$$128 \frac{K_c \rho}{L} + 2 \left( \frac{32 K_c \rho}{L} \right)^{2 + \frac{1+2\alpha}{\gamma+2(1-\alpha)}} < 1.$$

A demonstração deste resultado baseia-se também na finitude de momentos de ordem superior implicada pela estimativa inferior nos coeficientes de fragmentação. Mais particularmente, nas condições indicadas prova-se a seguinte propriedade de contração: existe um  $T^*$  tal que para todos os  $t \geq T^*$  e para qualquer par de soluções  $c$  e  $d$  das equações de coagulação-fragmentação, correspondentes a condições iniciais  $c_0$  e  $d_0$ , respectivamente, ambas com densidade  $\rho$ , verifica-se a desigualdade

$$\frac{d}{dt} \|c(t) - d(t)\|_2 \leq -\kappa \|c(t) - d(t)\|. \quad (79)$$

O ingrediente fundamental para se obter (79) consiste em estabelecer que

$$\frac{d}{dt} \|c - d\|_2 \leq \left( 2K \|c + d\|_3 - \frac{L}{16} \right) \|c - d\|_2$$

e em controlar o terceiro momento de  $c + d$  provando que, desde que a densidade  $\rho$  das condições iniciais (e portanto das soluções, as quais conservam a densidade) seja suficientemente pequena, se pode estimar uniformemente no tempo o seu valor por uma quantidade que é inferior ao termo negativo.

É possível que a restrição sobre o tamanho da densidade inicial possa ser melhorada, mas de momento, e tanto quanto sabemos, este é o melhor resultado que se consegue sobre a taxa de convergência das soluções de (47) para equilíbrios.

### 3.1.2 Equações com fragmentação fraca

No caso em que a fragmentação é fraca, num sentido que será precisado em breve, ocorre um fenómeno dinâmico extremamente interessante que é interpretado fisicamente como correspondente à existencia de uma transição de fase no sistema de partículas modelado por (47). O fenómeno é o seguinte: existe uma densidade crítica  $\rho_s \in (0, \infty)$  tal que

- (i) se a condição inicial  $c_0$  tem densidade  $\rho > \rho_s$ , então a solução  $c$  de (47) converge fracamente-\*, mas não fortemente, para o único equilíbrio  $c^{\rho_s}$  com densidade  $\rho_s$  (caso super-crítico),
- (ii) se a condição inicial  $c_0$  tem densidade  $\rho \leq \rho_s$ , então a solução  $c$  de (47) converge fortemente em  $X_1^+$  para o único equilíbrio  $c^\rho$  com densidade  $\rho$  (caso sub-crítico).

Note-se que no caso (i) a densidade da solução  $\omega$ -limite,  $c^{\rho_s}$ , é estritamente inferior à densidade da solução de (47) em qualquer instante  $t < \infty$ , enquanto que no caso (ii) a densidade da solução é conservada também no limite.

É interessante, antes de referir brevemente a história deste resultado e de prosseguir para o exame da sua demonstração, atentarmos numa possível interpretação deste comportamento como uma transição de fase.

Se considerarmos que cada componente  $c_j$  da solução  $c = (c_j)$  representa a concentração de um  $j$ -aglomerado microscópico no estado gasoso e que  $\rho$  é a densidade

do vapor, a quantidade  $\rho_s$  pode ser interpretada como a densidade de saturação do sistema. Assim, estando na presença de um vapor sobressaturado, isto é, com densidade  $\rho > \rho_s$ , não existe nenhum estado de equilíbrio do sistema gasoso com essa densidade e, portanto, o sistema evoluirá para um estado de equilíbrio saturado, com densidade exactamente igual à densidade de saturação  $\rho_s$ . A densidade em excesso,  $\rho - \rho_s$ , desaparece do sistema gasoso por condensação (o que corresponde a uma outra fase, já não modelada pelas variáveis  $c_j$  mas, heurísticamente, corresponde a um aglomerado incomensuravelmente maior do que qualquer  $j$ ). No caso do sistema estar num estado saturado ou sub-saturado, ou seja, com densidade  $\rho \leq \rho_s$ , então a evolução dar-se-á para o único estado de equilíbrio com essa densidade, conservando-se a densidade ao longo de todo o processo, incluindo no estado limite.

O comportamento que descrevemos acima foi primeiro provado no contexto das equações de Becker-Döring por Ball, Carr e Penrose em [11]. A convergência (fracas\*) para um equilíbrio é conseguida recorrendo a uma função de Liapunov, tal como foi descrito acima no contexto dos sistemas com fragmentação forte (cf. pág. 43), no entanto, no presente contexto a finitude de momentos de ordem superior, consequência das hipóteses sobre os coeficientes de fragmentação, não é válida, o que dificulta a obtenção da pré-compacidade das semi-órbitas positivas e a identificação da densidade do limite no caso sub-crítico. Para obter tal resultado necessitou-se, em [11], de se impôr um decaimento adicional (tipicamente, um decaimento exponencial [11, Eq.(5.10)]) na condição inicial, a saber

$$\sum_{j=1}^{\infty} \frac{c_{0j}}{M_j z_s^j} < \infty, \quad \text{onde } z_s \text{ é a única solução de } F(z_s) = \rho_s, \quad (80)$$

o qual permitiu controlar a cauda da solução  $(c_j(t))$ . Esta restrição foi posteriormente levantada em [9] recorrendo à observação de que, relativamente às variáveis  $x_n := \sum_{j=n}^{\infty} j c_j$ , é possível construir uma sobre-solução independentemente do comportamento de decaimento da condição inicial  $x_n(0)$ , o que permite garantir que a semi-órbita positiva é pré-compacta em  $X_1^+$ , ou seja, obter a convergência forte em  $X_1$ , o que garante que a densidade da solução limite é igual à densidade da solução a tempos finitos.

A extensão deste resultado para sistemas de coagulação-fragmentação (47) mais gerais que o de Becker-Döring revelou diversas dificuldades, só tendo tido verdadeiro êxito duas décadas depois, com o trabalho de Cañizo [26].

Uma primeira tentativa foi feita por Carr e da Costa [29] na qual, para os resultados sobre convergência forte das soluções no caso sub-crítico, foi feita a hipótese dos coeficientes de coagulação e de fragmentação satisfazerem uma condição de Becker-Döring generalizada

$$a_{j,k} = b_{j,k} = 0 \quad \text{se } j \wedge k > N. \quad (81)$$

onde  $N$  é um inteiro positivo fixo. O caso Becker-Döring clássico considera  $N = 1$  (cf. 18). Com esta hipótese, com a restrição (80) sobre a condição inicial e com

algumas condições técnicas sobre os coeficientes cinéticos análogas às utilizadas em [11], foi possível provar rigorosamente o comportamento (i) e (ii) descrito acima.

A tentativa de levantar as restrições sobre a regularidade da condição inicial feita por da Costa em [41] foi apenas parcialmente coroada de êxito, pois que o resultado então obtido, inspirado nos métodos de [9], era válido para condições iniciais em  $X_1^+$  sem decaimento adicional mas de densidade  $\rho$  limitada superiormente por um majorante  $\rho_N \sim \mathcal{O}(N^{-1})$  quando  $N \rightarrow \infty$ . Isto parecia ser indicativo de que o método utilizado era, não só insuficiente para lidar com o problema no sistema de Becker-Döring generalizado, mas totalmente desadequado para tratar o sistema de coagulação-fragmentação geral.

Apesar disto, a ideia de construir sobre-soluções, introduzida em [9], pôde ser cuidadosamente explorada por Cañizo, em [25], de modo a levantar a restrição sobre a densidade da condição inicial utilizada em [41]. Com as hipóteses sobre os coeficientes utilizadas nos trabalhos anteriormente citados [29, 41], Cañizo utilizou o mesmo tipo de argumento introduzido inicialmente por Ball e Carr, estabelecendo [25, Proposition 3.3] que, se  $z < z_s$ ,  $\lambda \in (1, \frac{z_s}{z})$  e se  $(\lambda_j)$  é uma sucessão decrescente satisfazendo a condição

$$\frac{\lambda_{j-1} - \lambda_j}{\lambda_j - \lambda_{j+1}} < \lambda,$$

então, se a condição inicial (nas variáveis  $x_n$  introduzidas acima) satisfaz  $x_n(0) \leq \lambda_n$  para todos os valores de  $n$ , existem constantes positivas  $C$  e  $n_0$  tais que  $x_n(t) \leq C\lambda_n$  para todos os  $n \geq n_0$  e todos os  $t > 0$ . A demonstração deste resultado de pré-compacidade baseia-se no estabelecimento da desigualdade diferencial para  $H_j(\cdot) := (x_j(\cdot) - C\lambda_j)^+$

$$\frac{d}{dt} \sum_{j=n_0}^{\infty} H_j \leq (\text{const}) \sum_{j=n_0}^{\infty} H_j,$$

donde o lema de Gronwall permite obter o resultado.

Na restante parte desta secção iremos apresentar o resultado mais geral, devido também a Cañizo, [26], que estabelece o comportamento de transição de fase descrito acima para o sistema geral de coagulação-fragmentação e, portanto, de certo modo completa o trabalho iniciado por Ball, Carr e Penrose em 1986 com a análise do sistema de Becker-Döring. O trabalho [26] impõe um decaimento adicional às condições iniciais, mas que, ao contrário do que se passava com o decaimento exponencial de [11, 29], refere-se, tipicamente, à existência de um momento de  $c_0 \in X_1^+$  de ordem inferior à segunda. Esta pequena restrição é muito largamente compensada pelo facto do resultado ser aplicável ao sistema de coagulação-fragmentação geral e não apenas às suas versões tipo Becker-Döring. Não é claro se esta restrição é, ou não, essencial.

As hipóteses consideradas em [26] são as seguintes:

**(H2)** (crescimento dos coeficientes cinéticos) Existem constantes  $K > 0$ ,  $\gamma \in \mathbb{R}$  e

$\lambda \in [0, 1)$  tais que

$$a_{j,k}, b_{j,k} \leq K (j^\lambda + k^\lambda) \quad (82)$$

$$\sum_{j=1}^{i-1} b_{j,i-j} \leq K i^\gamma, \quad \forall i \geq 1. \quad (83)$$

**(H3)** (balanço detalhado) Existe uma sucessão positiva  $(M_j)$  que satisfaz a condição (15).

**(H4)** (densidade crítica) Tem-se  $\lim M_j^{1/j} = z_s^{-1} \in (0, \infty)$  e  $\rho_s := F(z_s) \in (0, \infty]$ , em que  $F$  é definido por (69).

**(H5)** (regularidade de  $(M_j)$ ) A sucessão  $(M_j z_s^j)$  é decrescente.

**(H6)** (coagulação forte de monómeros) Existe uma constante  $K_1 > 0$  tal que

$$a_{j,1} \geq K_1 j^\lambda, \quad \forall j \geq 1 \quad (84)$$

**(H7)** (condições iniciais) Toma-se  $c_0 \in X_\mu^+$ , com  $\mu := \max\{2 - \lambda, 1 + \lambda, 1 + \gamma\}$ .

O resultado fundamental é o seguinte

**Teorema 12** [26] *Considere-se (H2)-(H7). Seja  $c$  uma solução de (47) com densidade (constante)  $\rho = \|c\|_1 = \|c_0\|_1$ .*

**(i)** *Se  $\rho > \rho_s$ , então  $c(t) \xrightarrow{*} (M_j z_s^j)$  quando  $t \rightarrow +\infty$ .*

**(ii)** *Se  $\rho \leq \rho_s$ , então  $c(t) \rightarrow c^{eq}$  fortemente em  $X_1$ , quando  $t \rightarrow +\infty$ , onde  $c^{eq}$  é o único equilíbrio com densidade  $\rho$ .*

*Esboço da demonstração:* A estratégia geral para provar este resultado é a que já tinha sido utilizada em [11] e em [25, 29] e consiste em mostrar que, se uma solução converge fracamente-\* para um equilíbrio com densidade estritamente inferior à densidade crítica  $\rho_s$ , então a convergência é forte em  $X_1$  e a densidade do limite é igual à densidade inicial.

O facto de todas as soluções de (47) convergirem fracamente-\* para equilíbrios era já conhecido, tendo sido estabelecido em [29] *sem* a hipótese Becker-Döring generalizada (a qual era somente imposta a fim de se identificar a densidade limite): nesse artigo ficou provado que, sob condições **(H2)-(H7)**, as soluções  $c$  de (47) satisfazem  $c(t) \xrightarrow{*} c^\rho$  quando  $t \rightarrow \infty$ , para algum  $\rho \leq \min\{\|c_0\|, \rho_s\}$ , onde  $c^\rho$  é a única solução de equilíbrio com densidade  $\rho$ .

Tal como no caso de sistemas com fragmentação forte que apresentámos anteriormente, para a demonstração deste resultado de convergência (fraca) para equilíbrios é de particular importância a existência de uma função de Liapunov.

A demonstração em [26] baseia-se no comportamento da função de Liapunov, no controlo da densidade pelo momento de ordem  $2 - \lambda$  e numa estimativa que estabelece que o crescimento deste último é, quanto muito, linear em  $t$ .

Cañizo obtém ainda um resultado sobre a taxa de convergência para o equilíbrio utilizando uma função de Liapunov um pouco diferente da função  $V$  definida anteriormente em (70) e pode ser interpretada como uma medida da energia da solução relativa a um determinado equilíbrio. Esta outra função de Liapunov já tinha sido utilizada por Jabin e Niethammer no estudo da taxa de convergência para equilíbrios nas equações de Becker-Döring[90]: para  $c \in X_1^+$ , seja  $V$  a função definida por (70) e, se  $z \in (0, z_s]$ , defina-se a *energia de  $c$  relativa ao equilíbrio*  $(M_j z^j)$  pela seguinte função

$$\mathcal{V}_z(c) := V(c) - (\log z) \sum_{j=1}^{\infty} j c_j + \sum_{j=1}^{\infty} M_j z^j. \quad (85)$$

Observe-se que, se  $\rho_s < \infty$  e se escolhermos  $z$  de modo a que  $c^{\text{eq}} = (M_j z^j)$  satisfaça  $\|c^{\text{eq}}\| = \|c\|$ , então é fácil verificar que podemos escrever  $\mathcal{V}_z(c) = V(c) - V(c^{\text{eq}})$ , o que justifica a designação escolhida para  $\mathcal{V}_z(c)$ .

A desigualdade fundamental para provar o Teorema 12, que relaciona a densidade de uma sucessão positiva  $c = (c_j)$  com o seu momento de ordem  $2 - \lambda$ , é válida desde que se tenha **(H2)**-**(H6)** e que sejam satisfeitas as condições  $c_1 \in (0, z_s)$  e  $c \in X_{2-\lambda}$ , e é a seguinte:

$$\|c\| - \sum_{j=1}^{\infty} j M_j c_1^j \leq C \sqrt{D} \sqrt{\|c\|_{2-\lambda}}, \quad (86)$$

onde  $C$  é uma constante positiva e  $D := D(c)$  é a função

$$D(c) := \sum_{j=1}^{\infty} a_j M_j \left( \frac{c_1 c_j}{M_j} - \frac{c_{j+1}}{M_{j+1}} \right) \left( \log \frac{c_1 c_j}{M_j} - \log \frac{c_{j+1}}{M_{j+1}} \right), \quad (87)$$

onde  $a_j = a_{j,1}$  se  $j \geq 2$ , e  $a_1 = \frac{1}{2} a_{1,1}$ . Esta função é designada em [26] pelo nome de *taxa de dissipação da energia livre de Becker-Döring*, o que é natural já que ficou provado em [11] que a evolução da função de Liapunov  $V$  ao longo de soluções  $c(t)$  da equação de Becker-Döring satisfaz

$$V(c(t)) = V(c(0)) - \int_0^t D(c(s)) ds.$$

Convém observar que, como  $(|x| - |y|)(\log |x| - \log |y|) > 0$  se  $|x| \neq |y|$ , a função  $D(c)$  é não negativa.

Note-se que (86) é uma relação puramente algébrica, não sendo imposto que a sucessão  $c$  seja solução de qualquer equação diferencial. Esta desigualdade é consequência da seguinte estimativa sobre o resto da série  $\sum_j j M_j c_1^j$ , válida sob as mesmas hipóteses,

$$\sum_{i=j+1}^{\infty} i M_i c_1^i \leq C j M_{j+1} c_1^{j+1}.$$

Supondo agora que as hipóteses do Teorema 12 são satisfeitas e que  $c = c(t)$  é uma solução de (47) com condição inicial  $c_0 \in X_{2-\lambda}$ , pode-se provar, recorrendo à aproximação de  $c$  por soluções de sistemas truncados, que  $\|c(t)\|_{2-\lambda}$  satisfaz a desigualdade diferencial  $\frac{d}{dt}\|c(t)\|_{2-\lambda} \leq (\text{const.})\rho^2$ , e, portanto, para alguma constante apropriada,  $C$ , independente de  $t$ , tem-se

$$\|c(t)\|_{2-\lambda} \leq C(1+t) \quad (88)$$

Como foi referido na página 48, a estratégia geral para provar o Teorema 12 consiste em mostrar que, se uma solução com densidade inicial  $\rho_0$  converge fracamente\* para um equilíbrio com densidade  $\rho < \rho_s$ , então a convergência é forte em  $X_1$  e, portanto,  $\rho = \rho_0$ .

Suponhamos, então, que  $c(t) \xrightarrow{*} c^{\text{eq}}$  quando  $t \rightarrow +\infty$ , onde  $c^{\text{eq}} = (M_j z^j)$  e  $z < z_s$ . Consequentemente  $c_1(t) \rightarrow z < z_s$  e, a partir de algum  $t_0$  suficientemente grande, tem-se  $c_1(t) \leq \frac{z+z_s}{2} < z_s$ . Usando (86) e (88) sabe-se que, para  $t \geq t_0$ ,  $\rho - \rho_1(t) \leq C\sqrt{D}\sqrt{1+t}$ , onde  $\rho_1(t) = \|(M_j c_1(t)^j)\|_1$ , e  $C$  é uma constante. Por continuidade de (69) no interior do seu intervalo de convergência, tem-se  $\rho_1(t) \rightarrow \rho_z := \|c^{\text{eq}}\|$  quando  $t \rightarrow \infty$ . Agora, ou  $\rho - \rho_1(t) > 0$  a partir de algum  $t_1$ , ou existirá uma sucessão  $t_n \rightarrow \infty$  para a qual  $\rho - \rho_1(t_n) \leq 0$ . Começemos por considerar o primeiro caso: se  $\rho - \rho_1(t) > 0$  a partir de algum  $t_1$  a desigualdade anterior resulta na estimativa  $D(c(t)) \geq C^{-2} \frac{(\rho - \rho_1(t))^2}{1+t}$  e a evolução da função de Liapunov  $V$  ao longo de soluções satisfaz

$$V(t) = V(t_1) - \int_{t_1}^t D_{CF}(c(s)) ds \quad (89)$$

$$\leq V(t_1) - \int_{t_1}^t D(c(s)) ds \quad (90)$$

$$\leq V(t_1) - C^{-2} \int_{t_1}^t \frac{(\rho - \rho_1(s))^2}{1+s} ds, \quad (91)$$

onde  $D_{CF}$  é a taxa de dissipação da energia livre de coagulação-fragmentação, definida por

$$D_{CF}(c) := \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{\infty} a_{i,j} M_i M_j \left( \frac{c_i c_j}{M_i M_j} - \frac{c_{i+j}}{M_{i+j}} \right) \left( \log \frac{c_i c_j}{M_i M_j} - \log \frac{c_{i+j}}{M_{i+j}} \right). \quad (92)$$

Vem a propósito lembrar que embora seja trivial derivar formalmente a equação de evolução (89) para  $V$ , o seu estabelecimento rigoroso está longe de ser simples [29, Theorem 5.2]. A desigualdade (90) vem do facto óbvio de que  $D_{CF}(c) \geq D(c) > 0$ . Pela limitação inferior da função de Liapunov  $V$  ao longo de soluções, o integral no membro direito de (91) tem de ser limitado superiormente, e, como  $\rho_1(t) \rightarrow \rho_z$ , conclui-se que tem de se ter  $\rho_z = \rho$ . Mas então, como  $c(t) \xrightarrow{*} c^{\text{eq}}$  e  $\|c(t)\| = \rho = \rho_z = \|c^{\text{eq}}\|$ , conclui-se, por [11, Lemma 3.3], que  $c(t) \rightarrow c^{\text{eq}}$  fortemente em  $X_1$ . Resta agora considerar a possibilidade de existir uma sucessão  $t_n \rightarrow \infty$  tal que

$\rho - \rho_1(t_n) \leq 0$ . Mas então  $\rho \leq \rho_1(t_n) \rightarrow \rho_z$  e portanto  $\rho \leq \rho_z$ . Do facto da norma de  $X_1$  ser uma função semicontinua inferior para a convergência fraca-\* sabemos que  $\rho_z \leq \rho$ , e, conseqüentemente, tem-se  $\rho_z = \rho$ , o que, como no caso anterior, termina a demonstração. ■

## 3.2 Comportamento auto-semelhante das soluções

Em contraste com o que se passa no caso de soluções de sistemas de coagulação-fragmentação, o estabelecimento da convergência de soluções de sistemas de coagulação para um equilíbrio é essencialmente elementar (cf. 3.2.1). Para estes sistemas, o problema interessante (e importante para as aplicações) é a elucidação de como se processa esta convergência. Um problema particularmente interessante é o do comportamento auto-semelhante de soluções, o qual consiste, *grosso modo*, na existência de um função (ou numa família de funções) para a qual convergem todas as soluções dos sistemas de coagulação após um apropriado re-escalamento das variáveis. Esta questão, de óbvia importância física, tem recebido ao longo do tempo bastante atenção na literatura de modelação matemática (cf., e.g. [58, 59, 81, 120, 121, 122, 125] e ref. cit.) mas apenas recentemente têm havido significativos avanços na sua análise rigorosa. No que se segue procuraremos passar em revista alguns destes resultados.

Problemas análogos ao do comportamento auto-semelhante de soluções, colocados no âmbito das equações de Becker-Döring ou das equações de coagulação-fragmentação, nomeadamente a relação das soluções do sistema de Becker-Döring com as do sistema de equações diferenciais parciais de Lifshitz-Slyozov-Wagner [108, 138] são extremamente interessantes mas não serão abordadas no presente trabalho.

### 3.2.1 Nas equações de coagulação de Smoluchowski

Começamos esta secção por concretizar a afirmação feita acima acerca da convergência para um equilíbrio das soluções da equação de Smoluchowski:

**Teorema 13** [29] *Seja  $a_{j,j} > 0$  para todos os  $j$ . Seja  $c$  uma solução de (30) em  $[0, \infty)$  com  $c_0 \in X_1^+$ . Então  $c(t) \xrightarrow{*} 0$  quando  $t \rightarrow +\infty$ .*

*Esboço da demonstração:* A ideia heurística da demonstração é clara: como o processo de coagulação resulta num aumento do tamanho médio dos aglomerados (cf. Secção 1.2) é de esperar que a densidade total dos aglomerados de massa inferior a um dado valor fixo diminua com o tempo. É esta propriedade de monotonia que permite a obtenção da convergência das soluções.

Concretizando esta ideia, seja  $c$  uma solução de (30) e, para cada  $n \in \mathbb{N}$ , considere-se

$$p_n(t) := \sum_{j=1}^n j c_j(t). \quad (93)$$

É claro que esta função mede a densidade total, no instante  $t$ , dos aglomerados de tamanho não superior a  $n$ . Utilizando (93) e a definição de solução (Definição 1) obtém-se facilmente que, para todos os  $t, \tau \geq 0$ ,

$$p_n(t + \tau) - p_n(t) = - \int_t^{t+\tau} \sum_{T_{1,n}^4} j a_{j,k} c_j(s) c_k(s) ds \leq 0, \quad (94)$$

onde  $T_{1,n}^4$  foi definido na página 37. Como  $c_n(t)$  e  $p_n(t)$  são funções não-negativas, conclui-se que existe uma sucessão positiva não-decrescente  $(\bar{p}_n)$  tal que  $p_n(t) \rightarrow \bar{p}_n$  quando  $t \rightarrow +\infty$ . Como  $c_n(t) = \frac{p_n(t) - p_{n-1}(t)}{n}$  conclui-se que também as funções  $c_n(t)$  convergem para constantes  $\bar{c}_n := \frac{\bar{p}_n - \bar{p}_{n-1}}{n} \geq 0$  quando  $t \rightarrow +\infty$ . A conclusão que  $\bar{c}_n \equiv 0$  segue facilmente por indução finita na versão integrada entre  $t$  e  $t + \tau$  da equação de coagulação [29]. ■

O problema que se coloca agora é o de investigar se as soluções de (30) convergem, ou não, para a solução nula de uma forma auto-semelhante. Ou seja, se, ou em que condições, existirá uma função  $\Phi$  tal que, para uma larga classe de condições iniciais, as soluções de (30) satisfazem

$$c_j(t) \approx \zeta(t)^{-a} \Phi(j\zeta(t)^{-b}), \quad \text{quando } t \rightarrow +\infty \text{ e } j \rightarrow +\infty, \quad (95)$$

onde  $\zeta(\cdot)$  é uma função positiva crescente e  $a$  e  $b$  são constantes positivas.

Pouco se sabe com rigor sobre o problema colocado com esta generalidade. O que apresentaremos de seguida são as respostas no caso de coeficientes de coagulação  $a_{j,k}$  particulares (constantes, aditivos e multiplicativos), para os quais técnicas baseadas na transformada de Laplace permitem-nos obter uma resposta rigorosa e completa.

Começaremos pelo caso de coeficientes constantes<sup>6</sup>  $a_{j,k} = 2$ . Este caso foi abordado por Kreer e Penrose [97] e por da Costa [40] utilizando uma ideia inicialmente considerada por Lushnikov [125] que se baseava na consideração da função geradora

$$\varphi(z, t) := \sum_{j=1}^{\infty} c_j(t) z^j, \quad |z| \leq 1. \quad (96)$$

Note-se que (96) é a transformada de Laplace discreta  $\sum_{j=1}^{\infty} c_j(t) e^{-jw}$ , ( $\text{Re}(w) \geq 0$ ), da solução  $c$  de (30). É fácil provar que  $\varphi$  é solução do problema de valores iniciais

$$\begin{cases} \frac{d\|c\|_0}{dt} = -\|c\|_0^2 \\ \frac{\partial \varphi}{\partial t} = \varphi^2 - 2\|c\|_0 \varphi \end{cases} \quad (97)$$

com  $\|c(0)\|_0 = N_0 := \|c_0\|_0$  e  $\varphi(z, 0) = \phi(z) := \sum_{j=1}^{\infty} c_{0j} z^j$ , donde se obtém imediatamente que

$$\varphi(z, t) = t^{-2} \frac{1}{N_0 + t^{-1}} \frac{\phi(z)}{N_0 + t^{-1} - \phi(z)}. \quad (98)$$

---

<sup>6</sup>A constante é irrelevante em termos de resultado, já que pode ser sempre transformada numa qualquer outra por re-escalamento do tempo; a escolha indicada simplifica os cálculos envolvidos.

Como  $\varphi(\cdot, t)$  é uma função analítica na bola unitária aberta  $B_1$  de  $\mathbb{C}$  podemos utilizar a fórmula integral de Cauchy para escrever

$$t^2 c_j(t) = \frac{1}{2\pi i} \frac{1}{N_0 + t^{-1}} \oint_{\gamma_0} \frac{1}{z^{j+1}} \frac{\phi(z)}{N_0 + t^{-1} - \phi(z)} dz, \quad (99)$$

onde  $\gamma_0 = \{z \in \mathbb{C} : |z| = r_0 < 1\}$ . Para se poder concluir algo sobre o comportamento assintótico do membro direito de (99) necessitamos de conhecer o comportamento dos zeros da função  $F(z, \tau) := N_0 + \tau - \phi(z)$  quando  $\tau \rightarrow 0$ . Com a hipótese adicional da condição inicial  $c_0$  satisfazer o decaimento exponencial  $c_{0j} \leq A(1 + \Delta)^{-j}$ , para algumas constantes  $A \geq 0$  e  $\Delta \in (0, 1)$ , prova-se que, para todos os  $\tau$  suficientemente pequenos existem  $q$  zeros simples de  $F(z, \tau)$ ,  $z_k(\tau)$ , que satisfazem  $|z_k(\tau)| > 1$  e  $z_k(\tau) = \omega_q^k \left(1 + \frac{1}{\|c_0\|_1} \tau + \mathcal{O}(\tau^2)\right)$ , quando  $\tau \rightarrow 0$ , onde  $\omega_q$  é a raiz  $q$  da unidade,  $e^{2\pi i/q}$ ; todas as restantes raízes de  $F(z, \tau)$  estão no exterior de  $B_1$  e mantêm-se a uma distância uniformemente positiva de  $\partial B_1$  quando  $\tau \rightarrow 0$ . A constante inteira positiva  $q$  é dada por  $q = \gcd \mathcal{J}(0)$ , onde  $\mathcal{J}(0)$  é o conjunto dos índices  $j$  para os quais  $c_{0j} > 0$  (cf. enunciado do Teorema 1, na página 27). Utilizando este resultado e a fórmula de representação (99) não é difícil provar o seguinte:

**Teorema 14** [40, 97] *Seja  $a_{j,k} \equiv 2$  e considere uma condição inicial  $c_0 \in X_1^+$  não-nula e com decaimento exponencial. Sejam  $q$  e  $\mathcal{J}(0)$  definidos anteriormente. Então, a solução  $c$  de (30) tem o comportamento auto-semelhante seguinte:*

$$\lim_{\substack{j, t \rightarrow +\infty \\ \xi = j/t \text{ fixed} \\ j \in \text{span}_{\mathbb{N}_0}(\mathcal{J}(0))}} t^2 c_j(t) = \frac{q}{\|c_0\|_1} e^{-\xi/\|c_0\|_1}. \quad (100)$$

Uma versão análoga deste resultado, válida para as equações de Smoluchowski contínuas, foi também provada por Kreer e Penrose em [97] e, com condições análogas de decaimento exponencial da condição inicial, estabelece exactamente o mesmo comportamento com as alterações óbvias de notação ( $x$  em vez de  $j$ ,  $c(x, t)$  em vez de  $c_j(t)$ , etc.):

$$\lim_{\substack{x, t \rightarrow +\infty \\ \xi = x/t \text{ fixed}}} t^2 c(x, t) = \frac{1}{\|n(x, 0)\|_1} e^{-\xi/\|n(x, 0)\|_1}. \quad (101)$$

Se os coeficientes  $a_{j,k}$  (ou  $a(x, y)$ ) não forem constantes, ou se a condição inicial não tiver decaimento exponencial, a técnica exposta não é aplicável.

Nestes casos, só bastante recentemente foi completada análise do problema do comportamento auto-semelhante das soluções numa série de notáveis artigos de Menon e Pego [133, 134, 135] (ver também [144]).

Estes trabalhos utilizam uma noção mais geral de solução, no sentido das medidas, permitindo tratar simultaneamente os casos discreto e contínuo das equações de Smoluchowski. Utilizando a transformada de Laplace modificada  $\varphi(z, t) := \int_0^\infty (1 - e^{-zx}) \nu_t(dx)$ , onde  $\nu_t(dx) = c(x, t) dx$  é a medida finita em  $(0, \infty)$  que descreve a distribuição de tamanhos dos aglomerados, Menon e Pego provaram o seguinte resultado:

**Teorema 15** [144] *Considerem-se os coeficientes de coagulação constantes  $a(x, y) \equiv 2$ , o instante inicial  $t_0 = 1$  e as condições iniciais satisfazendo  $\int_0^\infty \nu_1(dx) = 1$ . Seja  $\nu_t(dx)$  uma medida finita solução de (5)-(6). Seja  $F_t$  a função distribuição de probabilidade*

$$F_t(x) := \frac{\int_0^x \nu_t(dy)}{\int_0^\infty \nu_t(dy)} = t \int_0^x c(t, y) dy. \quad (102)$$

1. *Suponha-se que existe  $\lambda(t) \rightarrow \infty$  e uma distribuição de probabilidade  $F_*$  tal que, para algum  $x > 0$ ,  $F_*(x) < 1$  e tal que, nos seus pontos de continuidade, se verifica*

$$F_t(\lambda(t)x) \rightarrow F_*(x), \quad \text{quando } t \rightarrow \infty, \quad (103)$$

então

$$\int_0^x y \nu_1(dy) \sim x^{1-\rho} L(x), \quad \text{quando } x \rightarrow \infty, \quad (104)$$

para alguma constante  $\rho \in (0, 1]$  e alguma função  $L$  com variação lenta no infinito [74, pp. 275-9].

2. *Reciprocamente, suponha-se que (104) é válido. Então (103) verifica-se com*

$$F_*(x) := F_\rho(x) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1} x^{\rho k}}{\Gamma(1 + \rho k)}, \quad (105)$$

uma distribuição de Mittag-Leffler [74, pág. 453], cuja transformada de Laplace é  $\int_0^\infty e^{-zx} F_*(dx) = \frac{1}{1+z^\rho}$ .

Note-se que o Teorema 15 classifica todas as possíveis soluções auto-semelhantes da equação de Smoluchowski com coeficientes constantes, as quais são soluções do tipo

$$c(t, x) = t^{-1-1/\rho} n_\rho(t^{-1/\rho} x), \quad \rho \in (0, 1], \quad (106)$$

onde  $n_\rho(\cdot) = F'_\rho(\cdot)$  é a densidade da distribuição de Mittag-Leffler (105). É fácil verificar, por aplicação da transformada de Laplace, por aplicação do *ansatz* auto-semelhante para a transformada, análogo a (95), e por separação de variáveis, que as função (106) são efectivamente soluções de (5)-(6).

É interessante observar que se  $\nu_1(dx)$  tiver densidade finita, então  $\rho = 1$  e tem-se  $F_1(x) = 1 - e^{-x}$ , correspondendo a  $c(t, x) = \frac{1}{t^2} e^{-x/t}$ . Compare-se com o limite (101) de Kreer e Penrose. Este resultado é o análogo do Teorema Limite Central em teoria de probabilidades. As distribuições  $F_\rho$  com  $\rho \in (0, 1)$  têm densidade infinita e correspondem às distribuições estáveis de Lévy.

Menon e Pego conseguiram ainda melhorar o resultado de convergência de Kreer e Penrose referido anteriormente (cf. (101)) provando que a convergência para o limite auto-semelhante é uniforme na variável auto-semelhante  $x/t$ :

**Teorema 16** [134] *Considere-se uma condição inicial positiva,  $c(1, x) > 0$ , satisfazendo  $\int_0^\infty c(1, x)dx = \int_0^\infty xc(1, x)dx = 1$ . Suponha-se que a transformada de Fourier de  $xc(1, x)$  é integrável. Então verifica-se que*

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} \sup_{\frac{x}{t} > 0} \frac{x}{t} \left| t^2 c(t, x) - e^{-x/t} \right| = 0.$$

O mesmo resultado é válido, *mutatis mutandis*, para as soluções do sistema discreto (cf. [134, Theorem 2.2]).

Este tipo de resultados foram também provados por Menon e Pego [133], para os outros dois tipos “resolúveis” de coeficientes de coagulação: coeficientes aditivos,  $a(x, y) = x + y$ , e multiplicativos,  $a(x, y) = xy$ , para os quais estes autores conseguiram, recentemente, uma caracterização completa do atrator auto-semelhante [135].

Para além destes importantes resultados, válidos para coeficientes de coagulação “resolúveis”, apenas existe um resultado matematicamente rigoroso, devido a Fournier e Laurençot [76], estabelecendo a existência de (mas não a convergência para) soluções auto-semelhantes de sistemas contínuos de coagulação (5)-(6).

A abordagem de Fournier e Laurençot é completamente distinta das de Kreer e Penrose, da Costa, ou Menon e Pego, as quais, como se referiu anteriormente, assentam de uma forma essencial na utilização da transformada de Laplace. Fournier e Laurençot retomam a abordagem, comum na literatura Física e de modelação [59, 120], que consiste em utilizar o *ansatz* (95) directamente nas equações (5)-(6) de modo a obterem uma equação integro-diferencial para o perfil auto-semelhante  $\Phi(\cdot)$ , a qual provam que, para determinados tipos de coeficientes, tem uma solução fraca não identicamente nula. Esta abordagem é extremamente natural do ponto de vista matemático e foi certamente tentada por diversos matemáticos ao longo das últimas décadas; o facto de só no artigo [76], de 2004, esta ideia ter sido rigorosamente implementada atesta bem a enorme dificuldade técnica envolvida na sua concretização. Terminaremos esta Secção com uma muito breve descrição do resultado e da abordagem de [76].

Assuma-se que

$$c(t, x) = \varsigma(t)^{-2} \Phi(\varsigma(t)^{-1} x) \quad (107)$$

e suponha-se que os coeficientes de coagulação satisfazem a condição de homogeneidade

$$a(ux, uy) = u^\lambda a(x, y), \quad \forall u, x, y \in \mathbb{R}^+, \quad (108)$$

para alguma constante real  $\lambda$ .

Substituindo (107) em (5)-(6) e usando (108) obtém-se a equação

$$\gamma \frac{d}{dx} (x^2 \Phi(x)) + x Q_c(\Phi)(x) = 0 \quad (109)$$

$$\int_0^\infty x \Phi(x) dx = \rho, \quad (110)$$

para a função incognita  $\Phi$  e as incognitas reais positivas  $(\gamma, \rho)$ .

É fácil concluir que, se  $(\Phi, \gamma, \rho)$  for uma solução de (109)-(110), então cada um dos elementos da família a dois parâmetros  $(a\Phi(bx), a\gamma b^{-1-\gamma}, a\rho b^{-2})$  é também solução de (109)-(110). Isto significa que, sem perda de generalidade, pode-se considerar  $\gamma = \frac{1}{1-\lambda}, \rho = 1$ .

Uma função não-negativa  $\Phi \in L^1(0, \infty, xdx)$  é uma solução fraca de (109) se  $\Phi \in L^1(0, \infty, x^2dx)$ , se  $(x, y) \mapsto xy a(x, y)\Phi(x)\Phi(y) \in L^1(\mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}^+)$  e se

$$\gamma z^2 \Phi(z) = \int_0^z \int_{z-x}^\infty a(x, y)x\Phi(x)\Phi(y)dydx, \quad (111)$$

para quase todo o  $z \in \mathbb{R}^+$ . Consequentemente, se  $\Phi$  for uma solução fraca de (109) tem-se, para qualquer  $\phi \in C_b^1([0, \infty))$ ,

$$\gamma \int_0^\infty x^2 \Phi(x)\phi'(x)dx = \int_0^\infty \int_0^\infty xa(x, y)(\phi(x+y) - \phi(x))\Phi(x)\Phi(y)dydx. \quad (112)$$

É tecnicamente mais conveniente considerar a função incognita  $\tilde{\Phi}(x) = x\Phi(x)$  em vez de  $\Phi(x)$ , e, em vez de (112), escrever a versão fraca de (109) como

$$\gamma \int_0^\infty x\tilde{\Phi}(x)\phi'(x)dx = \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{a(x, y)}{y}(\phi(x+y) - \phi(x))\tilde{\Phi}(x)\tilde{\Phi}(y)dydx. \quad (113)$$

O resultado principal de [76] é o seguinte:

**Teorema 17** [76] *Considerem-se os coeficientes de coagulação satisfazendo uma das seguintes condições*

- (i)  $a(x, y) = (x^\alpha + y^\alpha)(x^{-\beta} + y^{-\beta}), \alpha \in [0, 1), \beta \in \mathbb{R}^+, \lambda = \alpha - \beta \in (-\infty, 1)$
- (ii)  $a(x, y) = (x^\alpha + y^\alpha)^\beta, \alpha \in [0, \infty), \beta \in \mathbb{R}^+, \lambda = \alpha\beta \in [0, 1)$
- (iii)  $a(x, y) = x^\alpha y^\beta + x^\beta y^\alpha, \alpha \in (0, 1), \beta \in (0, 1), \lambda = \alpha + \beta \in (0, 1)$

Seja  $\gamma = \frac{1}{1-\lambda}, \rho = 1$ . Então, existe uma solução fraca positiva  $\Phi$  de (109)-(110) e a função  $c_s(x, t) := t^{-2\gamma}\Phi(xt^{-\gamma})$ , com  $x, t > 0$ , é uma solução fraca (auto-semelhante) de (5)-(6) com densidade unitária para qualquer  $t > 0$ .

A abordagem de Fournier e Laurençot inicia-se com a seguinte discretização de (113)

$$-\frac{\gamma}{n} (i\mathbf{1}_{1 \leq i \leq n^2-1} f_{i+1} - (i-1)f_i) = \sum_{j=1}^{i-1} \frac{1}{j} a\left(\frac{i-j}{n}, \frac{j}{n}\right) f_{i-j} f_j - \sum_{j=1}^{n^2-i} \frac{1}{j} a\left(\frac{i}{n}, \frac{j}{n}\right) f_i f_j.$$

Considerando as soluções deste sistema de  $n^2$  equações como as soluções estacionárias de um sistema apropriado com  $n^2$  equações diferenciais ordinárias, obtém-se a existência de uma solução não-negativa,  $f = \tilde{f}^n$ , que satisfaz

$$\sum_{i=1}^{n^2} \tilde{f}_i^n = 1, \quad \forall n.$$

Com base nestas soluções,  $\tilde{f}^n$ , constroi-se uma sucessão de medidas de probabilidade indexadas em  $n$ ,

$$\tilde{\Phi}^n(dx) = \sum_{i=1}^{n^2} \tilde{f}_i^n \delta_{i/n}(dx). \quad (114)$$

Obtêm-se depois estimativas *a priori* para a sucessão das medidas  $(\tilde{\Phi}^n(dx))$ , a saber

$$\sup_{n \geq 1} \int_0^\infty x^\sigma \tilde{\Phi}^n(dx) < \infty, \quad (115)$$

onde o domínio de variação do parâmetro  $\sigma$  depende do tipo de coeficiente de coagulação, (i), (ii) ou (iii), considerado. De (114) e (115) conclui-se que a sucessão de medidas  $(\tilde{\Phi}^n(dx))$  é *tight* e portanto existe uma medida de probabilidade  $\tilde{\Phi}(dx)$  e uma subsucessão  $(\tilde{\Phi}^{n_k}(dx))$  tal que, para todas as funções  $\phi \in C_b^1([0, \infty))$ ,

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \int_0^\infty \phi(x) \tilde{\Phi}^{n_k}(dx) = \int_0^\infty \phi(x) \tilde{\Phi}(dx).$$

O último passo da demonstração consiste em provar que  $\tilde{\Phi}$  é solução de (113) e, portanto,  $\Phi(x) = \frac{\tilde{\Phi}(x)}{x}$  é uma solução fraca de (109)-(110).

O problema do comportamento auto-semelhante das soluções de (5)-(6), ou seja, da convergência das soluções de (5)-(6) para as soluções auto-semelhante cuja existência ficou estabelecida pelo Teorema 17, permanece actualmente ainda em aberto.

A abordagem natural para estudar este problema de estabilidade seria a de considerar a seguinte transformação auto-semelhante, mais geral que (107),

$$c(t, x) = \varsigma(t)^{-2} \varphi(\log \varsigma(t), \varsigma(t)^{-1} x)$$

e, substituindo em (5)-(6), obter uma equação de evolução para  $\varphi$  que permitisse concluir que, para alguma noção apropriada de convergência,  $\varphi(\log \varsigma(t), \cdot) \rightarrow \Phi(\cdot)$ , quando  $t \rightarrow +\infty$ . Até ao presente, esta ideia apenas pôde ser concretizada, no contexto da convergência fraca em  $L^1$ , para o caso de coeficientes constantes  $a(x, y) \equiv 1$ , recorrendo a funções de Liapunov cuja definição depende fortemente da forma conhecida do limite  $\Phi$ , [112], o que torna este método, natural e potencialmente promissor, de difícil aplicação quando se sai do âmbito dos coeficientes resolúveis, para os quais a forma explícita de  $\Phi$  é conhecida.

Este tipo de análise foi também utilizado com êxito na investigação da existência e estabilidade de soluções auto-semelhantes nas equações de Oort-Hulst-Safronov com coeficientes constantes [105] e com coeficientes aditivos [8].

### 3.2.2 Nos modelos de adição com entrada de monómeros

Um outro sistema para o qual o comportamento auto-semelhante de soluções foi investigado é o “modelo de adição” referido na página 31. Este modelo consiste no

sistema de coagulação de Smoluchowski em que os únicos coeficientes de coagulação eventualmente não-nulos são os que correspondem a reacções com monómeros,  $a_{j,k} = 0$  se  $k > 1$ . Utilizando a mesma notação para os coeficientes que a usada no sistema de Becker-Döring (cf. página 13) podemos escrever o modelo de adição como

$$\begin{cases} \dot{c}_1 &= -a_1 c_1^2 - c_1 \sum_{j=1}^{\infty} a_j c_j \\ \dot{c}_j &= a_{j-1} c_1 c_{j-1} - a_j c_1 c_j, \quad j \geq 2. \end{cases} \quad (116)$$

Devido ao papel especial desempenhado pelos monómeros na dinâmica de (116), não é de esperar que as soluções deste sistema exibam um comportamento auto-semelhante do tipo analisado na Secção anterior. Para que tal comportamento tenha possibilidade de ocorrer é necessário que o sistema (116) seja suplementado com uma fonte de monómeros, a qual poderá ser a existência de fragmentação, o que resulta no sistema de Becker-Döring usual, ou na presença de uma fonte exterior de monómeros. Nesta secção abordaremos este último caso.

Considere-se, então, que (116) é suplementado com uma fonte de monómeros que introduz monómeros no sistema a uma taxa  $J_1(t)$ . O sistema fica, então, o seguinte

$$\begin{cases} \dot{c}_1 &= J_1(t) - a_1 c_1^2 - c_1 \sum_{j=1}^{\infty} a_j c_j \\ \dot{c}_j &= a_{j-1} c_1 c_{j-1} - a_j c_1 c_j, \quad j \geq 2. \end{cases} \quad (117)$$

Este tipo de modelos têm sido utilizados no estudo da deposição cristalina epitaxial (cf., por exemplo [14]).

O estudo do comportamento auto-semelhante das soluções de (117) foi recentemente estudado em [48, 49, 50] no caso em que os coeficientes de coagulação são constantes,  $a_j \equiv 1$ , e a taxa de entrada de monómeros é do tipo polinomial  $J_1(t) = (1 + \varepsilon(t))\alpha t^\omega$ , onde  $\alpha > 0$  e  $\omega$  são constantes reais e  $\varepsilon(\cdot)$  é uma função contínua convergente para zero no infinito. A abordagem utilizada nestes trabalhos é distinta de qualquer das apresentadas na secção anterior e baseia-se, de um modo essencial, na possibilidade de, por definição da variável auxiliar

$$c_0 := \sum_{j=1}^{\infty} c_j, \quad (118)$$

escrever (117) na forma

$$\begin{cases} \dot{c}_0 &= (1 + \varepsilon(t))\alpha t^\omega - c_0 c_1, \\ \dot{c}_1 &= (1 + \varepsilon(t))\alpha t^\omega - c_0 c_1 - c_1^2, \\ \dot{c}_j &= c_1 c_{j-1} - c_1 c_j, \quad j \geq 2. \end{cases} \quad (119)$$

A observação essencial é que (119) pode ser estudado desacoplando o sistema constituido pelas primeiras duas equações, para as incógnitas  $(c_0, c_1)$ , do restante sistema de dimensão infinita, para as variáveis  $c_j(t)$  com  $j \geq 2$ . Mais ainda, considerando neste último sistema a mudança de escala de tempo definida por  $t \mapsto \zeta(t) :=$

$\int_{t_0}^t c_1(s)ds$ , o sistema infinito transforma-se no sistema linear triangular inferior

$$\tilde{c}_j' = \tilde{c}_{j-1} - \tilde{c}_j, \quad j \geq 2, \quad (120)$$

onde  $\tilde{c}_j(\varsigma) := c_j(t(\varsigma))$ . É imediato que (120) pode ser explicitamente resolvido recorrendo à fórmula de variação das constantes, obtendo-se

$$\tilde{c}_j(\varsigma) = e^{-\varsigma} \sum_{k=2}^j \frac{\varsigma^{j-k}}{(j-k)!} c_k(0) + \frac{1}{(j-2)!} \int_0^\varsigma \tilde{c}_1(\varsigma-s) s^{j-2} e^{-s} ds. \quad (121)$$

Assim, o estudo do comportamento auto-semelhante das soluções de (117) pode ser feito recorrendo à fórmula de representação (121), desde que a necessária informação sobre o comportamento da componente  $\tilde{c}_1(\varsigma)$  da solução seja conhecida e esta poderá ser obtida recorrendo ao estudo do comportamento das soluções do sistema bidimensional de equações diferenciais ordinárias

$$\begin{cases} \dot{c}_0 &= (1 + \varepsilon(t))\alpha t^\omega - c_0 c_1 \\ \dot{c}_1 &= (1 + \varepsilon(t))\alpha t^\omega - c_0 c_1 - c_1^2. \end{cases} \quad (122)$$

O resultado obtido em [48, 50] utilizando esta abordagem é o seguinte

**Teorema 18** [48, 50] *Seja  $a_j \equiv 1$  e  $J_1(t) = (1 + \varepsilon(t))\alpha t^\omega$ , com  $\alpha > 0$ ,  $\omega > -\frac{1}{2}$ , e  $\varepsilon(t)$  uma função contínua satisfazendo  $\varepsilon(t) \rightarrow 0$  quando  $t \rightarrow +\infty$ . Considere-se a constante definida por  $Q_0(\omega) := \left(\frac{3}{(1+2\omega)\alpha}\right)^{\frac{1}{2+\omega}} \left(\frac{2+\omega}{3}\right)^{r_0}$ , onde  $r_0 := \frac{1-\omega}{2+\omega}$ . Seja  $(c_j)$  uma solução de (117) com condição inicial  $(c_j(0)) \in X_\mu$ . Sejam  $\varsigma(t)$  e  $\tilde{c}_j(\varsigma)$  já definidos acima. Então*

$$(i) \quad \lim_{\substack{j, \varsigma \rightarrow +\infty \\ \eta = j/\varsigma \text{ fixo} \\ \eta \neq 1}} Q_0(\omega) \varsigma^{r_0} \tilde{c}_j(\varsigma) = \Phi_{1,\omega}(\eta) := \begin{cases} (1-\eta)^{-r_0} & \text{se } \eta < 1 \\ 0 & \text{se } \eta > 1, \end{cases}$$

(ii) *Adicionalmente, se  $c_j(0) = 0$  para  $j \geq 2$ ,*

$$\lim_{\substack{j, \varsigma \rightarrow +\infty \\ \xi = \frac{j-\varsigma}{\sqrt{\varsigma}} \text{ fixo} \\ \xi \in \mathbb{R}}} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{\frac{1}{2}} Q_0(\omega) \varsigma^{\frac{1}{2}r_0} \tilde{c}_j(\varsigma) = \Phi_{2,\omega}(\xi) := e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \int_0^{+\infty} y^{1-2r_0} e^{-\xi y^2 - \frac{1}{2}y^4} dy.$$

Na Figura 7 apresentam-se os gráficos de alguns destes perfis auto-semelhantes  $\Phi_{1,\omega}$  e  $\Phi_{2,\omega}$  para vários valores de  $\omega$ . É interessante observar que os perfis  $\Phi_{2,\omega}$  constituem algo semelhante a uma expansão interior da descontinuidade de salto que ocorre nos perfis  $\Phi_{1,\omega}$  em  $\eta = 1$  quando  $\omega \leq 1$ .

*Esboço da demonstração:* A fim de obter de (121) as conclusões expressas no Teorema 18 é necessário conhecer, não apenas o limite de  $\tilde{c}_1(\varsigma)$  quando  $\varsigma \rightarrow +\infty$ , mas a

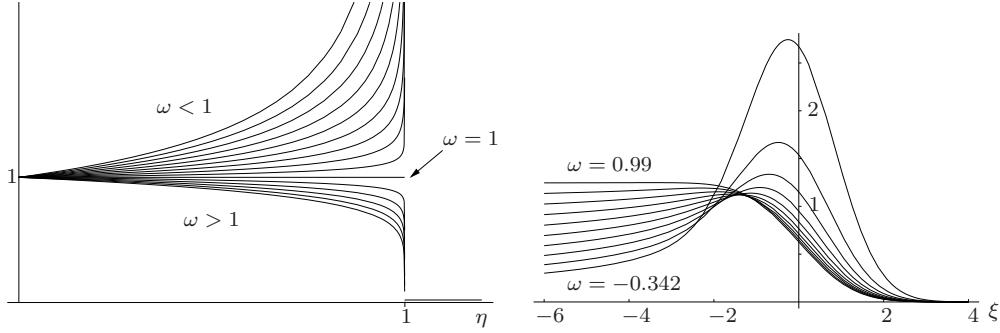


Figura 7: Gráficos dos limites auto-semelhantes do Teorema 18.

Na esquerda:  $\Phi_{1,\omega}$  para valores de  $\omega$  inferiores e superiores a 1 em incrementos de 0.1;

Na direita:  $\Phi_{2,\omega}$  com  $\omega$  de  $-0.342$  até  $0.99$  em incrementos de  $0.148$ .

sua taxa de convergência. Esta informação requer um estudo algo detalhado do comportamento assintótico das soluções de (122). No caso autónomo, quando  $\omega = 0$  e  $\varepsilon(t) \equiv 0$ , este estudo pode ser feito recorrendo ao estudo de regiões invariantes para a dinâmica de (122), a uma mudança de variáveis sugerida pelo método de compactificação de Poincaré e à utilização de variedades centrais [49], ou então recorrendo apenas a argumentos baseados em regiões invariantes e de monotonia [45]. Para o caso geral não autónomo, qualquer destas abordagens não parece ser aplicável e o estudo recorre a um *ansatz* para uma mudança de variáveis não-autónoma que é sugerido por resultados em [180]. Nestas novas variáveis o sistema (122) toma a forma

$$\begin{cases} x' &= (1 + \varepsilon(\tau) - xy) - A\tau^{-\frac{1}{2}}x^2 + B\tau^{-1}x \\ y' &= (1 + \varepsilon(\tau) - xy) \cdot A\tau^{-\frac{1}{2}} - A^2\tau^{-1}y, \end{cases} \quad (123)$$

onde  $\tau$  é o novo tempo, relacionado com o  $t$  utilizado em (122) pela equação diferencial  $\frac{d\tau}{dt} = \left(\frac{3\alpha^2}{1+2\omega}\right)^{1/3} t^{\frac{1+2\omega}{3}}$ , as constantes  $A$  e  $B$  são definidas por  $A := \left(\frac{1+2\omega}{4+2\omega}\right)^{\frac{1}{2}}$ , e  $B := \frac{1-\omega}{4+2\omega}$ , respectivamente, e o vector  $(x, y)$  é obtido de  $(c_1, c_0)$  pela mudança de variáveis não-autónoma referida acima. A exploração de determinadas desigualdades diferenciais, do comportamento das funções auxiliares  $h := xy$  e  $b := y - A\tau^{-\frac{1}{2}}x$  e de métodos da teoria qualitativa de equações diferenciais ordinárias, permite concluir [48, 50] que  $(x, y) \rightarrow (1, 1)$  quando  $\tau \rightarrow +\infty$  o que implica que

$$\left(\frac{3}{\alpha(1+2\omega)}\right)^{\frac{1}{3}} t^{\frac{1-\omega}{3}} c_1(t) \xrightarrow{t \rightarrow +\infty} 1. \quad (124)$$

Utilizando (124) e a mudança de variáveis  $t \mapsto \zeta$  conclui-se que

$$Q_0(\omega)\zeta^{\tau_0} \tilde{c}_1(\zeta) \xrightarrow{\zeta \rightarrow +\infty} 1, \quad (125)$$

e, usando este resultado e recorrendo a estimativas apropriadas na soma e no integral de (121), é possível obter os limites auto-semelhantes indicados no Teorema 18. ■

O que sucede se a taxa de adição de monómeros for inferior ao indicado no Teorema 18 foi parcialmente estudado por Sasportes em [157, Capítulos 4 e 5], tendo-se concluído que no caso  $\omega = -\frac{1}{2}$  existe ainda um perfil auto-semelhante para a variável  $\xi$ , correspondente a (i) no Teorema 18, sendo válido

$$\lim_{\substack{j, \varsigma \rightarrow +\infty \\ \eta = j/\varsigma \text{ fixo} \\ \eta \neq 1}} (1/2)^{1/3} (3/\alpha)^{2/3} \varsigma (\log \varsigma)^{2/3} \tilde{c}_j(\varsigma) = \Phi_{1, -1/2}(\eta),$$

mas que o limite indicado em (ii), para essa variável auto-semelhante, não existe. Por outro lado, nos casos  $\omega < -\frac{1}{2}$ , designados em [157, Capítulo 5] por casos com “adição lenta”, os resultados aí apresentandos, ainda que nalguns casos incompletos, apontam para a não existência de limites auto-semelhantes.

Terminamos esta secção assinalando que o tipo de comportamento auto-semelhante do Teorema 18(i) parece ser também válido no caso em que  $a_j = j^p$  com  $p < 1$ . Se bem que não rigorosos, cálculos preliminares formais [44, 51] sugerem que, para determinadas funções  $Q_p(\omega)$  e  $A(\omega, p)$ , para  $r_p = \frac{1-\omega(1-p)}{(2+\omega)(1-p)}$ , e para uma nova escala de tempo  $\tau = \left( \frac{(3-2p)A(\omega, p)}{2+\omega} \right)^{\frac{1}{1-p}} t^{\frac{2+\omega}{3-2p}}$ , deverá ser válido o comportamento seguinte

$$\lim_{\substack{j, \varsigma \rightarrow +\infty \\ \eta = j/\varsigma \text{ fixo} \\ \eta \neq 1}} Q_p(\omega) \varsigma^{r_p} \tilde{c}_j(\varsigma) = \Phi_{1, \omega, p}(\eta) := \begin{cases} \eta^{-p} (1 - \eta^{1-p})^{-r_p} & \text{se } \eta < 1 \\ 0 & \text{se } \eta > 1. \end{cases}$$

A demonstração rigorosa deste resultado permanece em aberto.

## 4 CONSERVAÇÃO DE DENSIDADE E GELIFICAÇÃO

Já por várias vezes neste trabalho foram referidas questões e resultados envolvendo a conservação, ou não-conservação, da densidade das soluções. O problema de caracterização dos coeficientes de reacção e dos dados iniciais para os quais se tem, ou não, conservação de densidade foi, durante muitos anos, um dos problemas centrais em aberto nos sistemas de coagulação-fragmentação e só teve progressos significativos na última década, primeiro com o trabalho de Jeon [91], utilizando uma abordagem probabilista, e depois por Escobedo, Mischler e Perthame [68] e por estes autores conjuntamente com Laurençot [67], utilizando métodos puramente analíticos.

Encarando as equações de coagulação-fragmentação como um modelo de cinética química, é natural esperar, devido à lei de conservação da massa, que a densidade das suas soluções seja constante ao longo do tempo. De facto, procedendo de modo meramente formal, se se substituir (4), (14) e (16) em  $\sum_{j=1}^{\infty} j \dot{c}_j$  obtém-se, após

algumas manipulações algébricas,  $\sum_{j=1}^{\infty} j\dot{c}_j = 0$ . Um resultado análogo se passa nas versões contínuas das equações.

As tentativas de tornar rigorosos estes cálculos formais esbarraram, desde cedo, com dificuldades talvez inesperadas e, com efeito, foram surgindo na literatura análises formais de situações (cf. e.g. [64, 70, 88, 188]) e exemplos rigorosos de casos particulares [22, 23] e de soluções [123, 124] em que não ocorria a conservação de densidade. Todos estes casos ocorriam em sistemas de coagulação de Smoluchowski quando os coeficientes de coagulação eram do tipo produto e cresciam rapidamente com o tamanho dos aglomerados. De seguida revemos, de modo breve, os primeiros estudos matematicamente rigorosos.

Os trabalhos iniciais sobre existência de soluções da equação de coagulação de Smoluchowski, desenvolvidos no início da década de 1960 por McLeod [129, 130, 131] investigaram a existência de solução de (30) com coeficientes de coagulação  $a_{j,k} = r_j r_k$  e com condição inicial  $c_{j0} = \delta_{j,1}$ . A condição, aí imposta, de convergência do momento de segunda ordem da solução,  $\|c(t)\|_2 < \infty$ , resulta em que, no caso  $r_j = j$ , o intervalo máximo de existência da solução é  $[0, 1]$ , no caso  $r_j \leq j$  o intervalo máximo contém  $[0, e^{-1}]$  e quando  $r_j = jq_j$ , com  $q_j \rightarrow +\infty$ , não existe solução de (30) em qualquer intervalo não degenerado. Observe-se que, para  $a_{j,k} \leq jk$ , a imposição da convergência do segundo momento da solução implica facilmente a conservação de densidade dessa solução (cf. (63)) e, de facto, relaxando esta condição sobre o segundo momento das soluções, Leyvraz e Tschudi provaram em [123] que a solução de McLeod para o caso  $r_j = j$  pode ser prolongada para  $t > 1$ . O método utilizado baseia-se na consideração da função geradora

$$G(t, z) := \sum_{j=1}^{\infty} \varphi_j(t) z^j, \quad \text{onde} \quad \varphi_j(t) := j c_j(t) e^{j \int_0^t \|c(s)\|_1 ds}.$$

Esta função geradora satisfaz a equação

$$\frac{\partial G}{\partial t} = zG \frac{\partial G}{\partial z}, \quad z \in (0, 1), \quad t > 0,$$

com  $G(0, z) = z$ , a qual pode ser integrada pelo método das características obtendo-se uma expressão para  $G$  que permite obter  $\varphi_j$  e, portanto,  $c_j$ . O resultado final é a solução de Leyvraz-Tschudi

$$c_j(t) = \begin{cases} \frac{j^{j-2}}{j!} t^{j-1} e^{-jt}, & \text{se } 0 \leq t \leq 1 \\ \frac{j^{j-2} e^{-j}}{j!} \frac{1}{t}, & \text{se } t > 1. \end{cases} \quad (126)$$

Daqui conclui-se sem dificuldade que esta solução não conserva densidade para tempos  $t > 1$ , verificando-se

$$\|c(t)\|_1 = \begin{cases} 1, & \text{se } 0 \leq t \leq 1 \\ \frac{1}{t}, & \text{se } t > 1. \end{cases}$$

Este mesmo resultado foi posteriormente re-derivado por Slemrod [163] sem recorrer à utilização de funções geradoras.

É interessante e importante observar que esta não conservação da densidade ocorre num instante de tempo finito (e.g.: na solução de Leyvraz-Tschudi em  $t = 1$ ) e não apenas no limite assintótico  $t \rightarrow +\infty$ , como se viu ser o caso nas equações de Becker-Döring e de coagulação-fragmentação com fragmentação fraca (cf. Secção 3.1.2). A interpretação física é, no entanto, semelhante à daquele caso: a densidade em falta,  $\|c(0)\|_1 - \|c(t)\|_1$ , corresponde à fuga de parte da massa do sistema para aglomerados cujo tamanho não é descrito pelos índices  $j \in \mathbb{N}$  (ou  $x \in \mathbb{R}^+$ , na versão contínua), ou seja, para estes efeitos, para um aglomerado de tamanho infinito (i.e., um tamanho que é, fisicamente, incomensuravelmente maior que qualquer  $j$ .) Este aglomerado infinito é interpretado, na literatura física, como um *gel* e o fenómeno do seu aparecimento designa-se por transição sol-gel, ou gelificação. O instante  $T_g \geq 0$  a partir do qual deixa de haver conservação de densidade (e.g.: na solução de Leyvraz-Tschudi  $T_g = 1$ ) designa-se por instante de gelificação.

Esta interpretação da não conservação da densidade devido a parte da massa do sistema escapar, em tempo finito, para um aglomerado infinito sugere também, heurísticamente, que tal fenómeno apenas ocorra quando os coeficientes de coagulação têm um forte crescimento com o tamanho dos aglomerados, implicando, assim, taxas de reacção que crescem muito rapidamente com este parâmetro. De facto, Leyvraz demonstrou em [124] que, se  $r_j = j^\alpha$ , com  $\alpha > \frac{1}{2}$ , então existe uma solução de (30), para uma condição inicial particular, que tem um instante de gelificação  $T_g = 0$ . Tanto este resultado como o referido anteriormente para o caso  $r_j = j$ , são exemplos de soluções de (30) correspondentes a condições iniciais muito particulares. São, no entanto, historicamente importantes, por terem sido, durante muitos anos, os únicos exemplos rigorosamente conhecidos de soluções que não conservavam densidade, apesar de ser conjecturado, e geralmente acreditado, que o fenómeno era mais geral e que todas as solução não nulas de (30) deveriam exibir gelificação, em algum instante  $T_g < +\infty$ , desde que  $a_{j,k} \geq (jk)^\alpha$  com  $\alpha > \frac{1}{2}$ .

O caso  $\alpha > 1$  foi estudado primeiro por van Dongen [56] e demonstrado rigorosamente por Carr e da Costa [28]:

**Teorema 19** [28] *Seja  $C_L(j^\alpha + k^\alpha) \leq a_{j,k} \leq C_U(jk)^\beta$ , com constantes  $C_L, C_U > 0$  e  $\beta > \alpha > 1$ . Seja  $c$  uma solução de (30) em  $[0, T)$  com  $c_0 \neq 0$ . Então,  $c$  não conserva densidade em qualquer intervalo  $[0, t_\infty)$ ,  $\forall t_\infty \leq T$ .*

*Esboço da demonstração:* A ideia fundamental da demonstração consiste num argumento de redução ao absurdo utilizando momentos de ordem superior: assumindo que  $c$  é uma solução que conserva a densidade num intervalo  $[0, t_\infty)$  e utilizando a limitação inferior dos coeficientes de coagulação, é possível obter a seguinte estimativa, válida para todos os valores de  $p > 1$ ,

$$\sum_{j=m}^{\infty} j^p c_j(t) \leq \|c_0\|_1 \sum_{j=m}^{\infty} j^{p-1} e^{-C_L \|c_0\|_1 j^{1-\alpha}(\varepsilon-t)/2}, \quad (127)$$

onde  $0 < t < \varepsilon < t_\infty$  e  $m$  é suficientemente grande. Obviamente que (127) implica que todos os momentos  $\|c(t)\|_p$  são finitos em  $(0, t_\infty)$  e é este o resultado que está na origem da contradição, pois a limitação inferior dos coeficientes, a hipótese de conservação da densidade e a utilização da desigualdade de Hölder permitem facilmente concluir que,  $\forall \delta, t, \tau \in (0, t_\infty)$  com  $\delta < t \leq \tau$ ,

$$\|c(t)\|_p - \|c(\delta)\|_p \geq pC_L\|c_0\|^{1-\frac{\alpha-1}{p-1}} \int_\delta^t \|c(s)\|_p^{1+\frac{\alpha-1}{p-1}} ds,$$

donde se obtém um tempo de explosão de  $\|c(t)\|_p$ ,  $T^{(p)}$ , que satisfaz  $\lim_{p \rightarrow +\infty} T^{(p)} \leq \delta$ . ■

Quando  $\alpha \in (\frac{1}{2}, 1]$ , os únicos resultados rigorosos que, durante muitos anos, foram conhecidos eram os trabalhos de Leyvraz e Tschudi [123] e de Leyvraz [124] acima referidos. Uma tentativa de da Costa [42] para provar que o mesmo tipo de comportamento ocorria para todas as soluções dos problemas de Cauchy (30), baseada em métodos de sistemas dinâmicos, permitiu identificar uma família mais vasta de soluções particulares que exibiam gelificação, mas não obteve êxito na resolução do problema geral, embora tivesse tido algum reflexo na análise numérica do fenómeno de gelificação [7]. Para o sistema contínuo, Laurençot provou em [103] que, se  $a(x, y) = r(x)r(y) + \alpha(x, y)$  com  $\alpha(x, y) \leq Ar(x)r(y)$  e  $r(x) \geq Rx$ , então todas as soluções exibem gelificação, tendo obtido também resultados sobre o decaimento da densidade total e sobre o instante de gelificação.

Em outros trabalhos foi também considerada a inclusão de fragmentação. Relembramos que, para condições sobre os coeficientes de coagulação para as quais se esperava que ocorresse gelificação, foi possível provar em [38] que, se a fragmentação for suficientemente forte, a solução obtida por limite de soluções de sistemas truncados é única e conserva a densidade (cf. Teorema 8, na página 35). Este resultado também encaixa bem na interpretação da gelificação como ocorrência de uma perda de massa para um aglomerado infinito, pois, heurísticamente, é de esperar que uma taxa elevada de fragmentação iniba a formação de aglomerados de tamanhos elevados e portanto force que toda a massa do sistema permaneça concentrada em aglomerados finitos.

O esclarecimento analítico rigoroso do problema da gelificação só foi conseguido, como já se referiu anteriormente, por Escobedo, Mischler e Perthame, em 2002, no artigo [68], e por Escobedo, Laurençot, Mischler e Perthame, no ano seguinte, em [67]. No que se segue apresentaremos, de modo necessariamente breve, os resultados e ideias das demonstrações presentes nesses dois trabalhos.

Começamos por observar que os resultados de [67, 68] dizem respeito ao comportamento das soluções do sistema de coagulação-fragmentação na versão contínua (17), mas a abordagem é válida, *mutatis mutandis*, para o caso discreto. Centraremos inicialmente a nossa atenção no caso da equação de coagulação:

**Teorema 20** [68] *Seja  $a(x, y) = \frac{1}{2}(x^\alpha y^\beta + x^\beta y^\alpha)$ , com  $0 \leq \alpha \leq \beta \leq 1$  e  $\lambda := \alpha + \beta > 1$ . Seja  $c$  uma qualquer solução fraca de (5)-(6) com condição inicial<sup>7</sup>*

<sup>7</sup>O espaço  $Y_1$  foi definido na página 25.

$c_0 \in Y_1$  não nula. Então, existe uma constante positiva  $C_* = C_*(M_1(0), M_0(0), \lambda)$  tal que, para qualquer  $t \geq 0$ ,

$$M_1(t) \leq \frac{C_*}{(1+t)^{1/\lambda}} \quad (128)$$

e, como consequência, o instante de gelificação é finito e satisfaz

$$T_g \leq T_* := \left( \frac{C_*}{M_1(0)} \right)^\lambda. \quad (129)$$

Neste enunciado utilizou-se a notação  $M_k(t) := \|c(t, \cdot)\|_{L^1(\mathbb{R}^+, y^k dy)}$ .  
*Esboço da demonstração:* A demonstração baseia-se na obtenção de estimativas integrais para a solução fraca utilizando funções teste apropriadas, as quais permitem concluir que, para todo o  $\tau \geq 0$ ,

$$\int_\tau^\infty M_1(t)^2 dt \leq C_\lambda M_0(0)^{\lambda-1} M_1(\tau)^{2-\lambda}, \quad (130)$$

o que, obviamente, implica que a densidade não pode ser constante e, sem grande dificuldade, permite concluir (128). Vejamos com um pouco mais de pormenor o argumento utilizado. A definição de solução fraca é semelhante à utilizada no caso discreto (cf. (34)): uma solução fraca de (5)-(6) será qualquer função  $c \in C([0, \infty); L^1) \cap L^\infty(0, T; Y_1)$ ,  $\forall T > 0$ , satisfazendo  $M_1(t) \leq M_1(0)$ ,  $\forall t \geq 0$ , tal que, para quaisquer  $t \geq \tau \geq 0$  e  $g \in L^\infty(0, \infty)$ , seja válido

$$\begin{aligned} & \int_0^\infty g(x)c(t, x)dx - \int_0^\infty g(x)c(\tau, x)dx = \\ & = \frac{1}{2} \int_\tau^t \iint_{\mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}^+} (g(x+y) - g(x) - g(y))a(x, y)c(s, x)c(s, y)dx dy ds. \end{aligned} \quad (131)$$

Seja  $c$  uma solução fraca de (5)-(6) e considere-se, em (131), a função teste  $g(x) = g_A(x) := x \wedge A \in L^\infty(0, \infty)$ . Como  $-(g_A(x+y) - g_A(x) - g_A(y)) \geq 0$  em  $\mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}^+$  pode-se estimar o membro direito de (131) retendo apenas a contribuição proveniente da integração sobre  $[A, \infty)^2$ , o que resulta imediatamente em

$$\int_\tau^t \left( \int_A^\infty x^{\lambda/2} c(s, x) dx \right)^2 ds \leq \frac{2M_1(\tau)}{A}. \quad (132)$$

Seja agora  $\Phi : [0, \infty) \rightarrow [0, \infty)$  uma função crescente, diferenciável q.t.p., nula na origem e tal que  $C_\Phi := \|\Phi'\|_{L^1(\mathbb{R}^+, y^{-1/2} dy)} < \infty$ . Escrevendo  $\Phi(x) = \int_0^x \Phi'(A) dA$ , utilizando o teorema de Fubini, a desigualdade de Cauchy-Schwarz e (132) conclui-se que

$$\int_\tau^t \left( \int_0^\infty x^{\lambda/2} \Phi(x) c(s, x) dx \right)^2 ds \leq 2C_\Phi^2 M_1(\tau). \quad (133)$$

Passando ao limite  $t \rightarrow \infty$  e escolhendo  $\Phi(x) := (x^{1-\lambda/2} - (R/2)^{1-\lambda/2})^+$ , com  $R > 0$  uma constante arbitrária, conclui-se que

$$\int_{\tau}^{\infty} \left( \int_R^{\infty} xc(s, x) dx \right)^2 ds \leq CR^{1-\lambda} M_1(\tau). \quad (134)$$

Finalmente, atendendo a que  $M_1(t)^2 \leq 2(\int_0^R xc(t, x) dx)^2 + 2(\int_R^{\infty} xc(t, x) dx)^2$ , e a que  $(\int_0^R xc(t, x) dx)^2 \leq R^{2-\lambda} M_{\lambda/2}(\tau)^2$ , tendo em atenção (134) e (131) com a função teste  $g \equiv 1$ , e fazendo  $R = M_1(\tau)/M_0(\tau)$  conclui-se a desejada estimativa (130). ■

O artigo de Escobedo, Mischler e Perthame [68] contém também uma extensa análise rigorosa de várias propriedades da densidade das soluções fracas de (5)-(6), incluindo o comportamento das soluções no instante de gelificação  $T_g$ .

Para além disso, a mesma abordagem foi também utilizada em [67, 68] para o caso do sistema contínuo de coagulação-fragmentação, tendo sido possível estabelecer o seguinte resultado

**Teorema 21** [67, 68] *Seja  $a(x, y) = \frac{1}{2}(x^\alpha y^\beta + x^\beta y^\alpha)$ , com  $0 \leq \alpha \leq \beta \leq 1$  e  $\lambda := \alpha + \beta$ . Seja  $b(x, y) = (1 + x + y)^\gamma$ , com  $\gamma \in \mathbb{R}$ . Então,*

- (i) *se  $\lambda \leq 1$  ou se  $\gamma > \lambda - 2$ , existe uma solução fraca de (17) que conserva a densidade*
- (ii) *se  $\lambda > 1$  e  $\gamma < \lambda - 2$ , existe uma densidade crítica  $\rho^* > 0$  tal que, se  $c_0 \in Y_1$  satisfaz  $\|c_0\|_{L^1(\mathbb{R}^+, y dy)} > \rho^*$ , então qualquer solução fraca de (17) com condição inicial  $c_0$  exibe gelificação.*

Note-se que o comportamento das soluções quando a condição sobre o expoente de fragmentação  $\gamma$  é (i) é o que surgia no caso de fragmentação forte no sistema discreto (cf. página 35), ou seja, mesmo em situações para as quais o sistema de coagulação exibia gelificação uma fragmentação suficientemente forte força a conservação de densidade.

O caso (ii) deixa em aberto o que se passa para densidades iniciais suficientemente baixas. Argumentos formais apresentados em [67] permitem conjecturar que, se  $\gamma \in ((\lambda-3)/2, \lambda-2)$ , há soluções fracas com dados iniciais com densidade suficientemente pequena para as quais a densidade é conservada, ao passo que, se  $\gamma < (\lambda-3)/2$ , todas as soluções não nulas exibem gelificação.

Os resultados expressos nos Teoremas 20 e 21 constituíram, como se afirmou no início desta secção, contribuições fundamentais para o esclarecimento do problema de conservação de densidade nestes sistemas, embora, tal como se acabou de observar, permaneçam em aberto várias questões relevantes, muitas delas, aliás, referidas em [67, 68].

## Agradecimentos

O meu trabalho em temas de coagulação-fragmentação iniciou-se com os estudos de doutoramento na Heriot-Watt University, em Edimburgo, sob orientação de Jack

Carr, e tem prosseguido com alguma regularidade desde então. Ao longo destes anos tenho beneficiado do contacto e discussões com colaboradores, colegas e outros matemáticos e físicos e gostaria de terminar listando, em ordem alfabética, o nome daqueles que, em alguma altura, contribuíram directamente para o meu trabalho e para a minha compreensão destes assuntos: Hans BABOVSKI, Luis BONILLA, Claudia CALIN, Jack CARR, Madalina DEACONU, Rachel DUNWELL, Pedro FREITAS, Gero FRIESECKE, Michael GRINFELD, Flavius GUIAŞ, Wilson LAMB, Philippe LAURENÇOT, Alexander LUSHNIKOV, Vassili KOLOKOLTSOV, Markus KREER, Waldyr OLIVA, Robert PEGO, Oliver PENROSE, João PINTO, Luísa RIBEIRO, Carlos ROCHA, Henry van ROESSEL, Rafael SASPORTES, Iain STEWART, Wolfgang WAGNER, Jonathan WATTIS e Dariusz WRZOSEK.

## Referências

- [1] M. Aizenman, T.A. Bak, Convergence to equilibrium in a system of reacting polymers, *Commun. Math. Phys.*, **65** (1979) 203–230.
- [2] D.J. Aldous, Deterministic and stochastic models for coalescence (aggregation, coagulation): a review of mean-field theory for probabilists, *Bernoulli*, **5** (1999) 3–48.
- [3] H. Amann, Coagulation-fragmentation processes, *Arch. Rat. Mech. Anal.*, **151** (2000) 339–366.
- [4] H. Amann, Ch. Walker, Local and global strong solutions to continuous coagulation-fragmentation equations with diffusion, *J. Diff. Equ.*, **218** (2005), 159–186.
- [5] H. Amann, F. Weber, On a quasilinear coagulation-fragmentation model with diffusion. *Adv. Math. Sci. Appl.*, **11** (2001), 227–263.
- [6] O. Arino, R. Rudnicki, Phytoplankton dynamics, *C. R. Biologies*, **327** (2004) 961–969.
- [7] H. Babovsky, On the modeling of gelation rates by finite systems, *Technisch Universität Ilmenau, Institut für Mathematik, Preprint No. M11/01* (August 2001).
- [8] V. Bagland, Ph. Laurençot, Self-similar solutions to the Oort-Hulst-Safronov coagulation equation, *SIAM J. Math. Anal.*, **39** (2007) 345–378.
- [9] J.M. Ball, J. Carr, Asymptotic behaviour of solutions to the Becker-Döring equations for arbitrary initial data, *Proc. Royal Soc. Edinburgh.*, **108A** (1988) 109–116.
- [10] J.M. Ball, J. Carr, The discrete coagulation-fragmentation equations: existence, uniqueness, and density conservation, *J. Stat. Phys.*, **61** (1990) 203–234.

- [11] 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.
- [12] J. Banasiak, W. Lamb, On the application of substochastic semigroup theory to fragmentation models with mass loss, *J. Math. Anal. Appl.*, **284** (2003) 9–30.
- [13] C. Baranger, *Collisions, coalescences et fragmentations des gouttelettes dans un spray: écriture précise des équations relatives au modèle TAB*. Prepublications du Centre de Mathématiques et de Leurs Applications, N<sup>o</sup>2001-21, Ecole Normale Supérieure de Cachan, 2001.
- [14] M.C. Bartlet, J.W. Evans, Exact island-size distributions in submonolayer deposition: influence of correlations between island size and separation, *Phys. Rev. B*, **54** (1996) R17359–R17362.
- [15] R. Becker, W. Döring, Kinetische Behandlung in übersättigten Dämpfern, *Ann. Phys. (Leipzig)*, **24** (1935) 719–752.
- [16] Ph. Bénilan, D. Wrzosek, On an infinite system of reaction-diffusion equations, *Adv. Math. Sci. Appl.*, **7** (1997) 349–364.
- [17] E.X. Berry, A mathematical framework for cloud models, *J. Atmos. Sci.*, **26** (1969) 109–111.
- [18] J. Bertoin, *Random fragmentation and coagulation processes*; Cambridge studies in advanced mathematics vol. 102, Cambridge University Press, Cambridge, 2006.
- [19] K. Binder, Theory for the dynamics of clusters, II. Critical diffusion in binary systems and the kinetics for phase separation, *Phys. Rev. B*, **15** (1977) 4425–4447.
- [20] P.J. Blatz, A.V. Tobolsky, Note on the kinetics of systems manifesting simultaneous polymerization-depolymerization phenomena, *J. Phys. Chem.*, **49** (1945) 77–80.
- [21] L. Bonilla, A. Carpio, J.C. Neu, W.G. Wolfer, Kinetics of helium bubble formation in nuclear materials, *Physica D*, **222** (2006) 131–140.
- [22] E. Buffet, J. Pulé, Gelation: the diagonal case revisited, *Nonlinearity*, **2** (1989) 373–381.
- [23] E. Buffet, R.F. Werner, A counter-example in coagulation theory, *J. Math. Phys.*, **32** (1991) 2276–2278.
- [24] J.J. Burton, Nucleation theory; in: B.J. Berne (Ed.), *Statistical Mechanics, Part A: Equilibrium Techniques*, Plenum Press, New York, 1997, pp. 195–234.

- [25] J.A. Cañizo, Asymptotic behaviour of solutions to the generalized Becker-Döring equations for general initial data, Proc. R. Soc. London Ser. A Math. Phys. Eng. Sci., **461** (2005) 3731–3745.
- [26] J.A. Cañizo, Convergence to equilibrium for the discrete coagulation-fragmentation equations with detailed balance, J. Stat. Phys., **129** (2007) 1–26.
- [27] J. Carr, Asymptotic behaviour of solutions to the coagulation-fragmentation equations. I. The strong fragmentation case, Proc. Royal Soc. Edinburgh., **121A** (1992) 231–244.
- [28] J. Carr, F.P. da Costa, Instantaneous gelation in coagulation dynamics, Z. angew. Math. Phys., **43** (1992) 974–983.
- [29] J. Carr, F.P. da Costa, Asymptotic behavior of solutions to the coagulation-fragmentation equations. II. Weak fragmentation, J. Stat. Phys., **77** (1994) 89–123.
- [30] J. Carr, R. Dunwell, Asymptotic behaviour of solutions to the Becker-Döring equations, Proc. Edinburgh Math. Soc., **42** (1999) 415–424.
- [31] J. Carr, R. Dunwell, Kinetics of cell surface capping, Appl. Math. Lett., **12** (1999) 45–49.
- [32] J. Carr, R.L. Pego, Very slow phase separation in one dimension; in: M. Rascle, D. Serre, M. Slemrod (Eds.), *PDEs and Continuum Models of Phase Transitions, Proceedings of an NSF-CNRS Joint Seminar held in Nice, France, January 18-22, 1988*, Lecture Notes in Physics, vol. 344, Springer-Verlag, Berlin, 1989, pp. 216–226.
- [33] J. Carr, R. Pego, Self-similarity in a coarsening model in one dimension, Proc. R. Soc. Lond. A, **436** (1992) 569–583.
- [34] J. Carr, R.L. Pego, Self-similarity in a cut-and-paste model of coarsening, Proc. R. Soc. Lond. A, **456** (2000) 1281–1290.
- [35] S. Chandrasekhar, Stochastic problems in physics and astronomy, Rev. Modern Phys., **15** (1941) 1–89.
- [36] Z. Cheng, S. Redner, Scaling theory of fragmentation, Phys. Rev. Lett., **60** (1988) 2450–2453.
- [37] F.P. da Costa, *Studies in coagulation-fragmentation equations*; Ph.D. Thesis, Heriot-Watt University, Edinburgh, 1993.
- [38] 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.

- [39] F.P. da Costa, On the positivity of solutions to the Smoluchowski equations, *Mathematika*, **42** (1995) 406–412.
- [40] F.P. da Costa, On the dynamic scaling behaviour of solutions to the discrete Smoluchowski equation, *Proc. Edinburgh Math. Soc.*, **39** (1996) 547–559.
- [41] F.P. da Costa, Asymptotic behaviour of low density solutions to the Generalized Becker-Döring equations, *Nonlinear Diff. Eq. Appl.*, **5** (1998) 23–37.
- [42] F.P. da Costa, A finite-dimensional dynamical model for gelation in coagulation processes, *J. Nonlinear Sci.*, **8** (1998) 619–653.
- [43] F.P. da Costa, Convergence to equilibria of solutions to the coagulation-fragmentation equations; in: T.-t. Li, L.-w. Lin, J.F. Rodrigues (Eds.), *Nonlinear Evolution Equations and Their Applications, Luso-Chinese Symposium, Macau 7-9 October 1998*, World Scientific, Singapore, 1999, pp. 45–56.
- [44] F.P. da Costa, Convergence to self-similarity in addition models with input of monomers, *Oberwolfach Reports*, **4** (Issue 4), (2007) 2754–2756.
- [45] F.P. da Costa, Dynamics of a differential system using invariant regions, *L’Enseignement Math.*, **53** (2007) 3–14.
- [46] F.P. da Costa, M. Grinfeld, J.B. McLeod, Unimodality of steady size distributions of growing cell populations, *J. Evol. Equ.*, **1** (2001) 405–409.
- [47] F.P. da Costa, M. Grinfeld, J.A.D. Wattis, A hierarchical cluster system based on Horton-Strahler rules for river networks, *Stud. Appl. Math.*, **109** (2002) 163–204.
- [48] F.P. da Costa, J.T. Pinto, R. Sasportes, Convergence to self-similarity in an addition model with power-like time-dependent input of monomers; in: V. Cutello, G. Fotia, L. Puccio (Eds.), *Applied and Industrial Mathematics in Italy II, Selected Contributions from the 8th SIMAI Conference*, Series on Advances in Mathematics for Applied Sciences, vol. 75, World Scientific, Singapore, 2007, pp. 303–314.
- [49] F.P. da Costa, H.J. van Roessel, J.A.D. Wattis, Long-time behaviour and self-similarity in a coagulation equation with input of monomers, *Markov Process. Related Fields*, **12** (2006) 367–398.
- [50] F.P. da Costa, R. Sasportes, Dynamics of a nonautonomous ODE system occurring in coagulation theory, *J. Dyn. Differential Equations*, **20** (2008) 55–85.
- [51] F.P. da Costa, R. Sasportes, J.A.D. Wattis, Similarity solutions of the Becker-Döring equations with size-dependent rate coefficients and time-dependent monomer input (resultados não publicados, 2007).
- [52] E.A. Coutias, M.J. Wester, A.S. Perelson, A nucleation theory of cell surface capping, *J. Stat. Phys.*, **87** (1997) 1179–1203.

- [53] P.V. Coveney, J.A.D. Wattis, Becker-Döring model of self-reproducing vesicles, *J. Chem. Soc., Faraday Trans.*, **92** (2) (1998) 233–246.
- [54] M. Deaconu, N. Fournier, E Tanré, A pure jump Markov process associated with Smoluchowski's coagulation equation, *Ann. Probab.*, **30** (2002) 1763–1796.
- [55] B. Derrida, C. Godrèche, I. Yekutieli, Scale-invariant regimes in one-dimensional models of growing and coalescing droplets, *Phys. Rev. A*, **44** (1991) 6241–6251.
- [56] P.G.J. van Dongen, On the possible occurrence of instantaneous gelation in Smoluchowski's coagulation equations, *J. Phys. A: Math. Gen.*, **20** (1987) 1889–1904.
- [57] P.G.J. van Dongen, Spatial fluctuations in reaction-limited aggregation, *J. Stat. Phys.*, **54** (1989) 221–271.
- [58] P.G.J. van Dongen, M.H. Ernst, Scaling solutions of Smoluchowski's coagulation equations, *J. Stat. Phys.*, **50** (1988) 295–329.
- [59] R.L. Drake, A general mathematical survey of the coagulation equation; in: G.M. Hidy, J.R. Brock (eds.), *Topics in current aerosol research (part 2)*, International Reviews in Aerosol Physics and Chemistry, Pergamon Press, Oxford, 1972, pp. 201–376.
- [60] W. Dreyer, F. Duderstadt, On the Becker/Döring theory of nucleation of liquid droplets in solids, *J. Stat. Phys.*, **123** (2006) 55–87.
- [61] P.B. Dubovskii, *Mathematical theory of coagulation*, Lecture Notes Series, **23**, Research Institute of Mathematics/Global Analysis Research Center, Seoul National University, Seoul, 1994.
- [62] P.B. Dubovski, A 'triangle' of interconnected coagulation models, *J. Phys. A: Math. Gen.* **32** (1999) 781–793.
- [63] M.H. Ernst, I. Pagonabarraga, The nonlinear fragmentation equation, *J. Phys. A: Math. Theor.*, **40** (2007) F331–F337.
- [64] M.H. Ernst, R.M. Ziff, E.M. Hendriks, Coagulation processes with a phase transition, *J. Coll. Interface Sci.*, **97** (1984) 266–277.
- [65] M. Escobedo, Ph. Laurençot, S. Mischler, Fast reaction limit of the discrete diffusive coagulation-fragmentation equation, *Commun. Partial Diff. Equ.*, **28** (2003) 1113–1133.
- [66] M. Escobedo, Ph. Laurençot, S. Mischler, On a kinetic equation for coalescing particles, *Commun. Math. Phys.*, **246** (2004) 237–267.

- [67] M. Escobedo, Ph. Laurençot, S. Mischler, B. Perthame, Gelation and mass conservation in coagulation-fragmentation models, *J. Diff. Eq.*, **195** (2003) 143–174.
- [68] M. Escobedo, S. Mischler, B. Perthame, Gelation in coagulation and fragmentation models, *Commun. Math. Phys.*, **231** (2002) 157–188.
- [69] M. Escobedo, S. Mischler, M. Rodriguez-Ricard, On self-similarity and stationary problems for fragmentation and coagulation models, *Ann. Inst. H. Poincaré Anal. Non Linéaire*, **22** (2005) 99–125.
- [70] F. Family, D.P. Landau (Eds.), *Kinetics of aggregation and gelation, Proceedings of the International Topical Conference on Kinetics of Aggregation and Gelation, April 2-4, 1984, Athens, Georgia, U.S.A.*, North-Holland, Amsterdam, 1984.
- [71] A. Fasano, F. Rosso, Dynamics of droplets in an agitated dispersion with multiple breakage. Part I: formulation of the model and physical consistency, *Math. Meth. Appl. Sci.*, **28** (2005) 631–659.
- [72] A. Fasano, F. Rosso, Dynamics of droplets in an agitated dispersion with multiple breakage. Part II: uniqueness and global existence, *Math. Meth. Appl. Sci.*, **28** (2005) 1061–1088.
- [73] A. Fasano, F. Rosso, A. Mancini, Implementation of a fragmentation-coagulation-scattering model for the dynamics of stirred liquid-liquid dispersions, *Physica D*, **222** (2006) 141–158.
- [74] W. Feller, *An introduction to probability theory and its applications, vol. II*, 2nd. Edition, Wiley, New York, 1971.
- [75] A.F. Filippov, On the distribution of the sizes of particles which undergo splitting, *Theory Prob. and its Applic.*, **6** (1961) 275–294.
- [76] N. Fournier, Ph. Laurençot, Existence of self-similar solutions to Smoluchowski's coagulation equation, *Commun. Math. Phys.*, **256** (2005) 589–609.
- [77] N. Fournier, Ph. Laurençot, Markus-Lushnikov processes, Smoluchowski's and Flory's models, *Stochastic Process. Appl.*, **119** (2009) 167–189.
- [78] N. Fournier, S. Mischler, Exponential trend to equilibrium for discrete coagulation equations with strong fragmentation and without a balance condition, *Proc. R. Soc. Lond. A*, **460** (2004) 2477–2486.
- [79] N. Fournier, S. Mischler, On a discrete Boltzmann-Smoluchowski equations with rates bounded in the velocity variables, *Comm. Math. Sci.*, **2** (suppl. 1) (2004) 55–63.

- [80] N. Fournier, S. Mischler, A spatially homogeneous Boltzmann equation for elastic, inelastic and coalescence collisions, *J. Math. Pures Appl.*, **84** (2005) 1173–1234.
- [81] S.K. Friedlander, *Smoke, dust, and haze: fundamentals of aerosol dynamics*, 2nd Ed., Topics in Chemical Engineering, Oxford University Press, New York, 2000.
- [82] A. Friedman, D.S. Ross, *Mathematical models in photographic science*, Mathematics in Industry, vol. 3, Springer-Verlag, Berlin, 2003.
- [83] G. Fusco, A geometry approach to the dynamics of  $u_t = \varepsilon^2 u_{xx} + f(x)$  for small  $\varepsilon$ ; in: K. Kirchgässner (Ed.), *Problems Involving Change of Type, Proceedings of a Conference Held at the University of Stuttgart, FRG, October 11-14, 1988*, Lecture Notes in Physics, vol. 359, Springer-Verlag, Berlin, 1990, pp. 53–73.
- [84] A. Gabriellov, W.I. Newman, D.L. Turcotte, Exactly soluble hierarchical clustering model: inverse cascades, self-similarity, an scaling, *Phys. Rev. E*, **60** (1999) 5293–5300.
- [85] M.L. Greer, L. Pujo-Menjouet, G.F. Webb, A mathematical analysis of the dynamics of prion proliferation, *J. Theor. Biol.*, **242** (2006) 598–606.
- [86] S. Großkinsky, C. Klingenberg, K. Oelschläger, A rigorous derivation of Smoluchowski's equation in the moderate limit, *Stochastic Anal. Appl.*, **22** (2004) 113–141.
- [87] F. Guiaş, *Coagulation-fragmentation processes: relations between finite particle models and differential equations*, Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, SFB 359, Preprint 41/1998, 1998. (PhD thesis).
- [88] E.M. Hendriks, M.H. Ernst, Critical properties for gelation: a kinetic approach, *Phys. Rev. Lett.*, **49** (8) (1982) 593–595.
- [89] M. Herrmann, M. Naldzhieva, B. Niethammer, On a thermodynamically consistent modification of the Becker-Döring equations, *Physica D*, **222** (2006) 116–130.
- [90] P.-E. Jabin, B. Niethammer, On the rate of convergence to equilibrium in the Becker-Döring equations, *J. Diff. Eq.*, **191** (2003) 518–543.
- [91] I. Jeon, Existence of gelling solutions for coagulation-fragmentation equations, *Comm. Math. Phys.*, **194** (1998) 541–567.
- [92] J. Ke, X. Wang, Z. Lin, Y. Zhuang, Scaling in the aggregation process with catalysis-driven fragmentation, *Physica A*, **338** (2004) 356–366.
- [93] A.N. Kolmogorov, Über das logarithmisch normale Verteilungsgesetz der Dimensionen der Teilchen bei Zerstückelung, *Dokl. Akad. Nauk SSSR*, **31** (1941) 99–101.

- [94] A.N. Kolmogorov, S.V. Fomin, *Elementos da teoria das funções e de análise funcional*, Editora Mir, Moscou, 1982.
- [95] V.N. Kolokoltsov, Hydrodynamic limit of coagulation-fragmentation type models of k-nary interacting particles, *J. Stat. Phys.*, **115** (2004) 1621–1653.
- [96] M. Kreer, Cluster equations for the Glauber kinetic Ising ferromagnet: I. Existence and uniqueness, *Ann. Physik*, **2** (1993) 720–737.
- [97] M. Kreer, O. Penrose, Proof of dynamic scaling in Smoluchowski’s coagulation equations with constant kernels, *J. Stat. Phys.*, **74** (1994) 389–407.
- [98] M. Lachowicz, Ph. Laurençot, D. Wrzosek, On the Oort-Hulst-Safronov coagulation equation and its relation to the Smoluchowski equation, *SIAM J. Math. Anal.*, **34** (2003) 1399–1421.
- [99] M. Lachowicz, D. Wrzosek, A nonlocal coagulation-fragmentation model, *Appl. Math. (Warsaw)*, **27** (2000) 45–66.
- [100] Ph. Laurençot, Uniforme integrabilite et théorème de de la Vallée Poussin, pp. 8, (nota não publicada, sem data).
- [101] Ph. Laurençot, Global solutions to the discrete coagulation equations, *Mathematika*, **46** (1999) 433–442.
- [102] Ph. Laurençot, Singular behaviour of finite approximations to the addition model, *Nonlinearity*, **12** (1999) 229–239.
- [103] Ph. Laurençot, On a class of continuous coagulation-fragmentation equations, *J. Diff. Eq.*, **167** (2000) 245–274.
- [104] Ph. Laurençot, The discrete coagulation equations with multiple fragmentation, *Proc. Edinburgh Math. Soc.*, **45** (2002) 67–82.
- [105] Ph. Laurençot, Convergence to self-similar solutions for a coagulation equation, *Z. angew. Math. Phys.*, **56** (2005) 398–411.
- [106] Ph. Laurençot, Self-similar solutions to a coagulation equation with multiplicative kernel, *Physica D*, **222** (2006) 80–87.
- [107] Ph. Laurençot, S. Mischler, The continuous coagulation-fragmentation equations with diffusion, *Arch. Rational Mech. Anal.*, **162** (2002) 45–99.
- [108] Ph. Laurençot, S. Mischler, From the Becker–Döring to the Lifshitz–Slyozov–Wagner equations, *J. Stat. Phys.*, **106** (2002) 957–991.
- [109] Ph. Laurençot, S. Mischler, From the discrete to the continuous coagulation-fragmentation equations, *Proc. Royal Soc. Edinburgh.*, **132A** (2002) 1219–1248.

- [110] Ph. Laurençot, S. Mischler, Global existence for the discrete diffusive coagulation-fragmentation equations in  $L^1$ , *Rev. Mat. Iberoamericana*, **18** (2002) 731–745.
- [111] Ph. Laurençot, S. Mischler, On coalescence equations and related models; in: P. Degond, L. Pareschi, G. Russo (Eds.), *Modelling and computational methods for kinetic equations*, Birkhäuser, Boston, 2004, pp. 321–356.
- [112] Ph. Laurençot, S. Mischler, Liapunov functional for Smoluchovski's coagulation equation and convergence to self-similarity, *Monatsh. Math.* **146** (2005) 127–142.
- [113] Ph. Laurençot, Ch. Walker, Well-posedness for a model of prion proliferation dynamics, *J. Evol. Equ.* **7** (2006) 241–264.
- [114] Ph. Laurençot, D. Wrzosek, The Becker-Döring model with diffusion. I. Basic properties of solutions, *Colloq. Math.* **75** (1998) 245–269.
- [115] Ph. Laurençot, D. Wrzosek, The Becker-Döring model with diffusion. II. Long time behaviour, *J. Diff. Eq.* **148** (1998) 268–291.
- [116] Ph. Laurençot, D. Wrzosek, The discrete coagulation equation with collisional breakage, *J. Stat. Phys.* **104** (2001) 193–253.
- [117] Lê Châu-Hoàn, *Etude de la classe des opérateurs  $m$ -accrétifs de  $L^1(\Omega)$  et accrétifs dans  $L^\infty(\Omega)$* ; Thèse de troisième cycle, Université de Paris VI, Paris, 1977.
- [118] M.H. Lee, A survey of numerical solutions to the coagulation equation, *J. Phys. A: Math. Gen.* **34** (2001) 10219–10241.
- [119] L. Levin, Yu.S. Sedunov, A kinetic equation describing microphysical processes in clouds, *Dokl. Akad. Nauk SSSR*, **170** (1966) 4–7.
- [120] F. Leyvraz, Scaling theory and exactly solved models in the kinetics of irreversible aggregation, *Phys. Rep.*, **383** (2003) 95–212.
- [121] F. Leyvraz, Rigorous results in the scaling theory of irreversible aggregation kinetics, *J. Nonlinear Math. Phys.*, **12** Suppl. 1 (2005) 449–465.
- [122] F. Leyvraz, Scaling theory for gelling systems: work in progress, *Physica D*, **222** (2006) 21–28.
- [123] F. Leyvraz, H.R. Tschudi, Singularities in the kinetics of coagulation processes, *J. Phys. A: Math. Gen.*, **14** (1981) 3389–3405.
- [124] F. Leyvraz, Existence and properties of pos-gel solutions for the kinetic equations of coagulation, *J. Phys. A: Math. Gen.*, **18** (1985) 321–326.

- [125] A.A. Lushnikov, Evolution of coagulating systems: II. Asymptotic size distributions and analytical properties of generating functions, *J. Coll. Interface Sci.*, **48** (1974) 400–409.
- [126] T. Matsoukas, S.K. Friedlander, Dynamics of aerosol agglomerate formation, *J. Coll. Interface Sci.*, **146** (1991) 495–506.
- [127] E.D. McGrady, R.M. Ziff, “Shattering” transition in fragmentation, *Phys. Rev. Lett.*, **58** (1987) 892–895.
- [128] D.J. McLaughlin, W. Lamb, A.C. McBride, A semigroup approach to fragmentation models, *SIAM J. Math. Anal.*, **28** (1997) 1158–1172.
- [129] J.B. McLeod, On an infinite set of non-linear differential equations, *Quart. J. Math. Oxford (2)*, **13** (1962) 119–128.
- [130] J.B. McLeod, On an infinite set of non-linear differential equations (II), *Quart. J. Math. Oxford (2)*, **13** (1962) 193–205.
- [131] J.B. McLeod, On a recurrence formula in differential equations, *Quart. J. Math. Oxford (2)*, **13** (1962) 283–284.
- [132] Z.A. Melzak, A scalar transport equation, *Trans. Amer. Math. Soc.*, **85** (1957) 547–560.
- [133] G. Menon, R.L. Pego, Approach to self-similarity in Smoluchowski’s coagulation equations, *Commun. Pure Appl. Math.*, **57** (2004) 1197–1232.
- [134] G. Menon, R.L. Pego, Dynamical scaling in Smoluchowski’s coagulation equations: uniform convergence, *SIAM J. Math. Anal.*, **36** (2005) 1629–1651.
- [135] G. Menon, R.L. Pego, The scaling attractor and ultimate dynamics for Smoluchowski’s coagulation equations, *J. Nonlinear Sci.*, **18** (2008) 143–190.
- [136] D. Morgenstern, Analytical studies related to the Maxwell-Boltzmann equation, *J. Rational Mech. Anal.* **4** (1955) 533–555.
- [137] H. Müller, Zur allgemeinen Theorie der raschen Koagulation, *Kolloidchemische Beihefte* **27** (1928) 223–250.
- [138] B. Niethammer, On the evolution of large clusters in the Becker-Döring model, *J. Nonlinear Sci.*, **13** (2003) 115–155.
- [139] H.-S. Niwa, School size statistics of fish, *J. Theor. Biol.*, **195** (1998) 351–361.
- [140] J.R. Norris, Smoluchowski’s coagulation equation: uniqueness, nonuniqueness and a hydrodynamic limit for the stochastic coalescent, *Annals Appl. Prob.*, **9** (1999) 78–109.

- [141] J.R. Norris, Notes on Brownian coagulation, *Markov Process. Related Fields*, **12** (2006) 407–412.
- [142] J.H. Oort, H.C. van de Hulst, Gas and smoke in interstellar space, *Bull. Astr. Inst. Netherlands* **10** (1946) 187–204
- [143] G.S. Oshanin, S.F. Burlatsky, Fluctuation-induced kinetics of reversible coagulation, *J. Phys. A: Math. Gen.*, **22** (1989) L973–L976.
- [144] R.L. Pego, Lectures on dynamics in models of coarsening and coagulation; in: W. Bao, J.-G. Liu (Eds.), *Dynamics in models of coarsening, coagulation, condensation and quantization*; Lecture Notes Series, Institute for Mathematical Sciences, National University of Singapore, vol. 9, World Scientific, Singapore, 2007, pp. 1–61.
- [145] O. Penrose, Metastable states for the Becker-Döring cluster equations, *Commun. Math. Phys.*, **124** (1989) 515–541.
- [146] O. Penrose, The Becker-Döring equations at large times and their connection with the LSW theory of coarsening, *J. Stat. Phys.*, **89** (1997) 305–320.
- [147] O. Penrose, J.L. Lebowitz, Towards a rigorous molecular theory of metastability; in: E.W. Montroll, J.L. Lebowitz (Eds.), *Studies in statistical mechanics VII: Fluctuation phenomena*, North-Holland, Amsterdam, 1987, pp. 321–375.
- [148] B. Perthame, *Transport equations in biology*, *Frontiers in Mathematics*, Birkhäuser Verlag, Basel, 2007.
- [149] K. Pesz, G.J. Rodgers, Kinetics of growing and coalescing droplets, *J. Phys. A: Math. Gen.*, **25** (1992) 705–713.
- [150] V.N. Piskunov, A.M. Petrov, Condensation/coagulation kinetics for mixture of liquid and solid particles: analytical solutions, *Aerosol Sci.*, **33** (2002) 647–657.
- [151] T. Pöschel, N.V. Brilliantov, C. Frömmel, Kinetics of prion growth, *Biophys. J.*, **85** (2003) 3460–3474.
- [152] H.R. Pruppacher, J.D. Klett, *Microphysics of Clouds and Precipitation*, 2nd ed., *Atmospheric and Oceanographic Sciences Library*, vol. 18, Kluwer, Dordrecht, 1997.
- [153] M.M. Rao, Z.D. Ren, *Theory of Orlicz spaces*, *Pure and Applied Mathematics*, vol. 146, Marcel Dekker, New York, 1991.
- [154] F. Rezakhanlou, The coagulating brownian particles and Smoluchowski’s equation, *Markov Process. Related Fields*, **12** (2006) 425–445.
- [155] J.-M. Roquejoffre, Ph. Villedieu, A kinetic model for droplet coalescence in dense sprays, *Math. Meth. Models Appl. Sci.*, **11** (2001) 867–882.

- [156] V. Safronov, *Evolution of the protoplanetary cloud and formation of the earth and the planets*, Israel Program for Scientific Translations, Jerusalem, 1972.
- [157] R. Sasportes, *Dynamical problems in coagulation equations*, Universidade Aberta, Lisboa, 2007. (Tese de doutoramento).
- [158] W.T. Scott, Analytic studies of cloud droplet coalescence I, *J. Atmos. Sci.*, **25** (1968) 54–65.
- [159] R. Simha, Kinetics of degradation and size distribution of long chain polymers, *J. Appl. Phys.*, **12** (1941) 569–578.
- [160] G. Simonett, Ch. Walker, On the solvability of a mathematical model for prion proliferation, *J. Math. Anal. Appl.*, **234** (2006) 580–603.
- [161] M. Slemrod, Trend to equilibrium in the Becker-Döring cluster equations, *Nonlinearity*, **2** (1989) 429–443.
- [162] M. Slemrod, Coagulation-diffusion systems: derivation and existence of solutions for the diffuse interface structure equations, *Physica D*, **46** (1990) 351–366.
- [163] M. Slemrod, A note on the kinetic equations of coagulation, *J. Integral Eq. Appl.*, **3** (1991) 167–173.
- [164] M. Slemrod, Metastable fluid flow described via a discrete-velocity coagulation-fragmentation model, *J. Stat. Phys.*, **83** (1996) 1067–1108.
- [165] M. Slemrod, The Becker-Döring equation; in: N. Bellomo, M. Pulvirenti (Eds.), *Modelling in applied sciences, a kinetic theory approach; modelling and simulation in science, engineering and technology*, Birkhäuser, Boston, 2000, pp. 149–171.
- [166] M. Slemrod, A. Qi, M. Grinfeld, I. Stewart, A discrete velocity coagulation-fragmentation model, *Math. Meth. Appl. Sci.*, **18** (1995) 959–993.
- [167] M.v. Smoluchowski, Drei Vorträge über Diffusion, Brownsche Molekularbewegung und Koagulation von Kolloidteilchen, *Physik. Zeitschr.*, **17** (1916) 557–571, 587–599.
- [168] M.v. Smoluchowski, Versuch einer mathematischen Theorie der Koagulationskinetik kolloider Lösungen, *Zeitschrift f. physik. Chemie*, **92** (1917) 129–168.
- [169] J. Spouge, An existence theorem for the discrete coagulation-fragmentation equations, *Math. Proc. Cambridge Phil. Soc.*, **96** (1984) 351–357.
- [170] R.C. Srivastava, Parametrization of raindrop size distributions, *J. Atmos. Sci.*, **35** (1978) 108–117.
- [171] R.C. Srivastava, A simple model of particle coalescence and breakup, *J. Atmos. Sci.*, **39** (1982) 1317–1322.

- [172] I.W. Stewart, A global existence theorem for the general coagulation-fragmentation equation with unbounded kernels, *Math. Meth. Appl. Sci.*, **11** (1989) 627–648.
- [173] I.W. Stewart, A uniqueness theorem for the coagulation-fragmentation equation, *Math. Proc. Camb. Phil. Soc.*, **107** (1990) 573–578.
- [174] R. Straube, M. Falcke, Reversible clustering under the influence of a periodically modulated binding rate, *Phys. Rev. E*, **76** (2007) 010402(R).
- [175] R.D. Vigil, I. Vermeersch, R.O. Fox, Destructive aggregation: aggregation with collision-induced breakage, *J. Colloid Int. Sci.*, **302** (2006) 149–158.
- [176] P.G.J. van Dongen, On the possible occurrence of instantaneous gelation in Smoluchowski's coagulation equation, *J. Phys. A: Math. Gen.*, **20** (1987) 1889–1904.
- [177] Ch. Walker, Coalescence and breakage processes, *Math. Meth. Appl. Sci.*, **25** (2002) 729–748.
- [178] Ch. Walker, Prion proliferation with unbounded polymerization rates, *Electr. J. Diff. Equ.*, **15** (2007) 387–397.
- [179] C. Wang, S.K. Friedlander, The self-preserving particle size distribution for coagulation by brownian motion, *J. Coll. Interface Sci.*, **22** (1966) 126–132.
- [180] J.A.D. Wattis, Similarity solutions of a Becker-Döring system with time-dependent monomer input, *J. Phys. A: Math. Gen.*, **37** (2004) 7823–7841.
- [181] J.A.D. Wattis, An introduction to mathematical models of coagulation-fragmentation processes: a discrete deterministic mean-field approach, *Physica D*, **222** (2006) 1–20.
- [182] J.A.D. Wattis, Exact solutions for cluster-growth kinetics with evolving size and shape profiles, *J. Phys. A: Math. Gen.*, **39** (2006) 7283–7298.
- [183] G.F. Webb, *Theory of nonlinear age-dependent population dynamics*, Marcel Dekker, New York, 1985.
- [184] D. Wilkins, A geometrical interpretation of the coagulation equation, *J. Phys. A: Math. Gen.*, **15** (1982) 1175–1178.
- [185] W.H. White, A global existence theorem for Smoluchowski's coagulation equations, *Proc. Amer. Math. Soc.*, **80** (1980) 273–276.
- [186] D. Wrzosek, Existence and uniqueness for the discrete coagulation-fragmentation model with diffusion, *Topol. Meth. Nonlin. Anal.*, **9** (1997) 279–296.
- [187] D. Wrzosek, Mass-conserving solutions to the discrete coagulation-fragmentation with diffusion, *Nonlinear Anal.*, **49** (2002) 297–314.

- [188] R.M. Ziff, G. Stell, Kinetics of polymer gelation, *J. Chem. Phys.* **73** (7) (1980) 3492–3499.
- [189] R.M. Ziff, E.D. McGrady, Kinetics of polymer degradation, *Macromolecules*, **19** (1986) 2513–2519.