

РАЗРЕШИМОСТЬ РЕГУЛЯРИЗОВАННОЙ КРАЕВОЙ ЗАДАЧИ О ХАОТИЧНОЙ ДИНАМИКЕ ПОЛИМЕРНОЙ МОЛЕКУЛЫ

В. Н. СТАРОВОЙТОВ 

Abstract: This paper deals with a parabolic partial differential equation that describes the chaotic dynamics of a polymer chain in water solution. This equation includes a non-linear nonlocal in time term and the integral of the solution over the space domain that stands in a denominator. For this reason, a regularized problem is considered. The regularization prevents vanishing this integral. The weak solvability of the initial boundary value problem for this equation is proven.

Keywords: polymer chain, chaotic dynamics, nonlocal parabolic equation, initial boundary value problem, solvability.

1 Постановка задачи и основной результат

Пусть Ω — ограниченная область в \mathbb{R}^n , $n \geq 2$, с липшицевой границей $\partial\Omega$. В пространственно-временном цилиндре $\Omega_T = \Omega \times (0, T)$, $T \in (0, \infty)$,

STAROVOITOV, V. N., SOLVABILITY OF A REGULARIZED BOUNDARY VALUE PROBLEM OF CHAOTIC DYNAMICS OF A POLYMER MOLECULE.

© 2023 СТАРОВОЙТОВ В. Н.

Работа выполнена за счёт гранта Российского научного фонда №23-21-00261, <https://rscf.ru/project/23-21-00261/>.

Поступила 1 января 2023 г., опубликована 31 декабря 2023 г.

рассмотрим следующую краевую задачу:

$$\partial_t u - \Delta u + \varphi \left(\int_0^T \frac{u(\cdot, t)}{I_\alpha(u)(t)} dt \right) u = 0, \quad (1)$$

$$I_\alpha(u)(t) = \max \left\{ \alpha, \int_\Omega u(x, t) dx \right\},$$

$$u(x, 0) = u_0(x), \quad (2)$$

$$u(x, t) = 0 \quad \text{при } x \in \partial\Omega, \quad (3)$$

где $x = (x_1, \dots, x_n)$ — пространственная переменная в \mathbb{R}^n , $t \in [0, T]$ — скалярная переменная, $u : \Omega_T \rightarrow \mathbb{R}$ — неизвестная функция, которую требуется определить в результате решения задачи, φ — так называемый потенциал взаимодействия, условия на который будут выписаны ниже, α — положительное вещественное число.

При $\alpha = 0$ данная задача описывает динамику полимерной молекулы (цепочки) в водном растворе (см. [1]). Поскольку полимерная цепочка движется хаотично, для описания её движения используется вероятностный подход. Переменная t играет роль параметра длины дуги вдоль полимерной цепочки и соответствует номеру звена цепи. То есть $t = 0$ в первом звене и T есть длина всей цепочки. Функция $\rho = u/I_\alpha(u)$ при $\alpha = 0$ представляет собой распределение плотности вероятности того, что t -е звено цепочки находится в точке $x \in \Omega$. В аргументе потенциала взаимодействия φ стоит интеграл от ρ по всей длине цепочки, так как каждое звено цепи взаимодействует со всеми остальными через окружающую жидкость. По своему смыслу функция ρ должна быть неотрицательной, поэтому и решение задачи u необходимо искать в классе неотрицательных функций, а функция φ должна быть определена на $\mathbb{R}_+ = [0, +\infty)$. Здесь возникает проблема, связанная с тем, что определение функции ρ может потерять смысл при $\alpha = 0$. В общем случае не удалось доказать, что $\int_\Omega u(x, t) dx > 0$ для всех $t \in [0, T]$, поэтому в аргументе функции φ может появиться неопределённость типа $0/0$. Заметим, в случае ограниченной функции φ эту оценку получить удаётся и такая неопределённость не возникает (см. [2]). В данной работе будет рассмотрена задача с неограниченным потенциалом φ , поэтому будет предполагаться, что $\alpha > 0$.

Несмотря на довольно простой вид уравнения (1), решение краевой задачи (1)–(3) связано с преодолением нескольких математических сложностей. Например, в уравнении присутствует интеграл от решения по всему интервалу $(0, T)$, на котором решается задача. Если назвать переменную t временем, как обычно поступают при исследовании параболических уравнений, то наличие такого интеграла означает, что текущее состояние системы зависит не только от предшествующих по времени состояний, но и от будущих. Эта ситуация необычна для параболических задач. Кроме того, при исследовании разрешимости нелинейных

параболических задач часто решение строится сначала на малом промежутке времени, а потом продолжается на весь интервал $(0, T)$. В нашем случае применение такого подхода невозможно. В последнее время стали появляться работы, посвящённые преодолению трудности, связанной с «глобальностью» уравнения по времени (см. [2, 3, 4, 5, 6, 7, 8]).

Мы будем использовать стандартные функциональные пространства Лебега и Соболева $L^p(\Omega)$, $H_0^1(\Omega)$, $L^q(0, T; L^p(\Omega))$ и $L^q(0, T; H_0^1(\Omega))$, где $p, q \in [1, \infty]$. Норма в $L^2(\Omega)$ будет обозначаться через $\|\cdot\|$.

Определение 1. Пусть $\varphi : \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}_+$ — непрерывная функция, $T \in (0, \infty)$, $\alpha > 0$, $u_0 \in L^2(\Omega)$ и $u_0 \geq 0$. Функцию $u : \Omega_T \rightarrow \mathbb{R}_+$ назовём обобщённым решением задачи (1)–(3), если

(1) $u \in L^2(0, T; H_0^1(\Omega))$, а также $\varphi(\zeta) u \in L^1(\Omega_T)$, где

$$\zeta(x) = \int_0^T \frac{u(\cdot, t)}{I_\alpha(u)(t)} dt;$$

(2) интегральное тождество

$$\int_0^T \int_\Omega (u \partial_t h - \nabla u \cdot \nabla h - \varphi(\zeta) u h) dx dt + \int_\Omega u_0 h_0 dx = 0$$

выполняется для произвольной гладкой в Ω_T функции h , такой что $h(x, t) = 0$ при $x \in \partial\Omega$ и при $t = T$. Здесь $h_0 = h|_{t=0}$.

Основным результатом данной работы является следующее утверждение.

Теорема 1. Предположим, что $T \in (0, \infty)$, $\varphi : \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}_+$ — непрерывная функция, $u_0 \in L^2(\Omega)$ и $u_0 \geq 0$. Тогда для любого $\alpha > 0$ существует обобщённое решение $u \in L^\infty(0, T; L^2(\Omega)) \cap L^2(0, T; H_0^1(\Omega))$ задачи (1)–(3), такое что $u \geq 0$ и справедлива энергетическая оценка:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \operatorname{ess\,sup}_{t \in [0, T]} \|u(\cdot, t)\|^2 + \int_0^T \|\nabla u(\cdot, t)\|^2 dt \\ + \int_0^T \int_\Omega \varphi(\zeta(x)) u^2(x, t) dx dt \leq \frac{1}{2} \|u_0\|^2. \end{aligned} \quad (4)$$

Более того, $\partial_t u$ определена почти всюду в Ω_T и

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_T} t |\partial_t u(x, t)|^2 dx dt + \frac{1}{2} \operatorname{ess\,sup}_{t \in [0, T]} \left(t \|\nabla u(\cdot, t)\|^2 \right. \\ \left. + t \int_\Omega \varphi(\zeta(x)) u^2(x, t) dx \right) \leq \frac{1}{4} \|u_0\|^2. \end{aligned} \quad (5)$$

Практически без изменения приведённого ниже доказательства данный результат легко может быть получен для слегка более общей задачи. Например, в уравнении (1) можно добавить правую часть из пространства $L^2(\Omega_T)$, заменить оператор Лапласа на эллиптический дифференциальный оператор дивергентного вида.

2 Доказательство теоремы о разрешимости задачи

Зафиксируем произвольное $\alpha > 0$ и проведём доказательство теоремы 1, разбив его для удобства на несколько шагов.

ШАГ 1. Рассмотрим сначала случай, когда φ — ограниченная функция, то есть существует постоянная $K \in \mathbb{R}_+$, такая что $\varphi(\xi) \leq K$ для всех $\xi \in \mathbb{R}_+$. Этот случай был рассмотрен в работе [2], где получен результат о слабой разрешимости задачи для $\alpha = 0$, то есть в более сложной ситуации. Там было необходимо доказать, что $\int_{\Omega} u(\cdot, t) dx$ не обращается в нуль при $t \in (0, T)$. Если $\alpha > 0$, то $I_{\alpha}(u)$ является строго положительным и доказательство упрощается. Таким образом, теорема 1 справедлива в этом случае. Мы не будем воспроизводить рассуждения из [2], а лишь сделаем некоторые замечания.

Так как φ — непрерывная ограниченная функция, полученное в [2] решение задачи обладает большей гладкостью, которая зависит от гладкости начальных данных и правой части уравнения. Это следует из общей теории линейных параболических уравнений (см., например, [9]). В нашем случае правая часть равна нулю, а $u_0 \in L^2(\Omega)$, поэтому несложно получить, что $\partial_t u$ и Δu являются элементами пространства $L^2(\Omega_T)$ и уравнение (1) выполняется почти всюду в Ω_T .

ШАГ 2. Пусть теперь потенциал φ удовлетворяет условиям теоремы, но не является ограниченным. Для каждого $k \in \mathbb{N}$ определим следующую функцию:

$$\varphi_k(\xi) = \begin{cases} \varphi(\xi), & \varphi(\xi) \leq k, \\ k, & \text{иначе.} \end{cases}$$

Обозначим через u_k обобщённое решение задачи (1)–(3) с потенциалом φ_k . Так как функция φ_k ограничена, существование u_k доказано на предыдущем шаге. Заметим также, что в силу принципа максимума функции u_k являются неотрицательными. Введём обозначение:

$$\zeta_k = \int_0^T \frac{u_k(\cdot, t)}{I_{\alpha}(u_k)(t)} dt.$$

Согласно определению 1 каждая функция u_k удовлетворяет интегральному тождеству

$$\int_0^T \int_{\Omega} (u_k \partial_t h - \nabla u_k \cdot \nabla h - \varphi_k(\zeta_k) u_k h) dx dt + \int_{\Omega} u_0 h_0 dx = 0 \quad (6)$$

для произвольной гладкой в замыкании области Ω_T функции h , такой что $h(x, t) = 0$ при $x \in \partial\Omega$ и при $t = T$. Энергетическая оценка для u_k

выглядит следующим образом:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \operatorname{ess\,sup}_{t \in [0, T]} \|u_k(\cdot, t)\|^2 + \int_0^T \|\nabla u_k(\cdot, t)\|^2 dt \\ + \int_0^T \int_{\Omega} \varphi_k(\zeta_k(x)) u_k^2(x, t) dx dt \leq \frac{1}{2} \|u_0\|^2. \end{aligned} \quad (7)$$

Из этой оценки следует, что последовательность $\{u_k\}$ содержит подпоследовательность (которую мы обозначим снова через $\{u_k\}$), которая сходится $*$ -слабо в $L^\infty(0, T; L^2(\Omega))$ и слабо в $L^2(0, T; H_0^1(\Omega))$ к некоторой функции u . Для того, чтобы показать, что u является обобщённым решением задачи (1)–(3), нам необходимо осуществить предельный переход при $k \rightarrow \infty$ в равенстве (6). Ясно, что

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \int_0^T \int_{\Omega} (u_k \partial_t h - \nabla u_k \cdot \nabla h) dx dt = \int_0^T \int_{\Omega} (u \partial_t h - \nabla u \cdot \nabla h) dx dt.$$

Единственная проблема заключается в доказательстве того, что

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \int_0^T \int_{\Omega} \varphi_k(\zeta_k) u_k h dx dt = \int_0^T \int_{\Omega} \varphi(\zeta) u h dx dt. \quad (8)$$

При установлении этого факта возникают некоторые сложности, связанные с тем, что функция φ может расти на бесконечности произвольным образом и является просто непрерывной на \mathbb{R}_+ . Мы не предполагаем, что она является монотонной или выпуклой. Поэтому необходимо обосновать даже то, что правая часть в (8) имеет смысл. Более того, сильная сходимости в каком-нибудь $L^p(\Omega_T)$ (или даже $H^m(\Omega_T)$) или сходимости почти всюду последовательностей $\{u_k\}$ и $\{\zeta_k\}$ не влекут (8) автоматически. Доказательству равенства (8) будет посвящён следующий шаг.

ШАГ 3. Домножив уравнение (1) для u_k на $t \partial_t u_k(x, t)$ и проинтегрировав по Ω_T , в силу (7) нетрудно получить, что

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_T} t |\partial_t u_k(x, t)|^2 dx dt \\ + \frac{1}{2} \operatorname{ess\,sup}_{t \in [0, T]} \left(t \|\nabla u_k(\cdot, t)\|^2 + t \int_{\Omega} \varphi_k(\zeta_k(x)) u_k^2(x, t) dx \right) \\ \leq \frac{1}{2} \int_{\Omega_T} (|\nabla u_k(x, t)|^2 + \varphi_k(\zeta_k(x)) u_k^2(x, t)) dx dt \leq \frac{1}{4} \|u_0\|^2. \end{aligned} \quad (9)$$

Множитель t необходим, поскольку в теореме предполагается лишь, что $u_0 \in L^2(\Omega)$. Из этой оценки следует, что $u_k \rightarrow u$ при $k \rightarrow \infty$ сильно в $L^2(\Omega_T)$ и (с точностью до подпоследовательности) почти всюду в Ω_T . Поэтому $\zeta_k \rightarrow \zeta$ при $k \rightarrow \infty$ почти всюду в Ω .

Для того, чтобы установить (8), мы возьмём произвольную гладкую функцию $h : \Omega_T \rightarrow \mathbb{R}$ и докажем, что

$$\varphi_k(\zeta_k) \int_0^T u_k h dt \rightarrow \varphi(\zeta) \int_0^T u h dt \quad \text{при } k \rightarrow \infty \text{ в } L^1(\Omega). \quad (10)$$

Заметим, что мы зафиксировали тестовую функцию h , поэтому далее нельзя выбирать подпоследовательности из последовательности приближённых решений задачи. Эти подпоследовательности и их пределы будут, вообще говоря, зависеть от h . Для доказательства (10) мы воспользуемся теоремой Витали о сходимости (см., например, [10, п. 4.8.7]).

Нетрудно видеть, что $\varphi_k(\zeta_k) \rightarrow \varphi(\zeta)$ при $k \rightarrow \infty$ почти всюду в Ω . В самом деле, обозначим через D множество точек $x \in \Omega$, таких что $\zeta_k(x) \rightarrow \zeta(x)$ при $k \rightarrow \infty$. В силу сходимости почти всюду, $\mu_n(\Omega \setminus D) = 0$, где μ_n — n -мерная мера Лебега. Для каждой точки $x \in D$ существует такое число $k_{x,1} \in \mathbb{N}$, что $\varphi(\zeta(x)) + 1 < k_{x,1}$. Так как функция φ непрерывна, найдётся такое $k_{x,2} \in \mathbb{N}$, что $|\varphi(\zeta_k(x)) - \varphi(\zeta(x))| < 1$ для всех $k > k_{x,2}$. Поэтому $\varphi(\zeta_k(x)) < k$ и, как следствие, $\varphi_k(\zeta_k(x)) = \varphi(\zeta_k(x))$ при $k > \max\{k_{x,1}, k_{x,2}\}$. Опять используя непрерывность функции φ , мы заключаем, что $\varphi_k(\zeta_k(x)) = \varphi(\zeta_k(x)) \rightarrow \varphi(\zeta(x))$ при $k \rightarrow \infty$ для всех $x \in D$.

Таким образом,

$$\varphi_k(\zeta_k) \int_0^T u_k h dt \rightarrow \varphi(\zeta) \int_0^T u h dt \quad \text{при } k \rightarrow \infty \text{ почти всюду в } \Omega,$$

и согласно теореме Витали для доказательства (10) осталось установить, что последовательность $\{\varphi_k(\zeta_k) \int_0^T u_k h dt\}$ является равномерно абсолютно интегрируемой на Ω . Пусть $R = \max_{(x,t) \in \Omega_T} |h(x,t)|$, E — произвольное измеримое множество в Ω , $E_T = E \times [0, T]$ и $G_M^k = \{(x,t) \in E_T \mid |u_k(x,t)| \geq M\}$. Тогда

$$\begin{aligned} \int_{G_M^k} \varphi_k(\zeta_k) |u_k h| dx dt &\leq \frac{R}{M} \int_{G_M^k} \varphi_k(\zeta_k) u_k^2 dx dt \\ &\leq \frac{R}{M} \int_{\Omega_T} \varphi_k(\zeta_k) u_k^2 dx dt \leq \frac{C_1 R}{M}, \end{aligned}$$

где $C_1 = \|u_0\|^2/2$ — постоянная из оценки (7). Кроме того,

$$\int_{E_T \setminus G_M^k} \varphi_k(\zeta_k) |u_k h| dx dt \leq MR \int_{E_T \setminus G_M^k} \varphi_k(\zeta_k) dx dt \leq MRT \int_E \varphi_k(\zeta_k) dx.$$

Поэтому

$$\begin{aligned} \left| \int_E \varphi_k(\zeta_k) \int_0^T u_k h dt dx \right| &= \left| \int_{E_T} \varphi_k(\zeta_k) u_k h dx dt \right| \\ &\leq \frac{C_1 R}{M} + MRT \int_E \varphi_k(\zeta_k) dx. \quad (11) \end{aligned}$$

Оценим $\int_E \varphi_k(\zeta_k) dx$. Сначала заметим, что

$$\int_{\Omega} \varphi_k(\zeta_k(x)) \zeta_k^2(x) dx \leq \frac{T}{\alpha^2} \int_0^T \int_{\Omega} \varphi_k(\zeta_k(x)) u_k^2(x, t) dx dt \leq \frac{C_1 T}{\alpha^2}.$$

Если $E_N^k = \{x \in E \mid |\zeta_k(x)| > N\}$, где $N \in (0, \infty)$, то из последней оценки следует, что

$$\int_{E_N^k} \varphi_k(\zeta_k) dx \leq \frac{1}{N^2} \int_{E_N^k} \varphi_k(\zeta_k) \zeta_k^2 dx \leq \frac{C_1 T}{N^2 \alpha^2}.$$

Поскольку функция φ непрерывна, существует постоянная $\gamma_N > 0$, такая что $\varphi(\xi) \leq \gamma_N$ для всех $\xi \in [0, N]$. Поэтому

$$\int_{E \setminus E_N^k} \varphi_k(\zeta_k) dx \leq \int_{E \setminus E_N^k} \varphi(\zeta_k) dx \leq \gamma_N \mu_n(E).$$

Таким образом,

$$\int_E \varphi_k(\zeta_k) dx \leq \frac{C_1 T}{N^2 \alpha^2} + \gamma_N \mu_n(E).$$

Подставляя эту оценку в (11), мы получим

$$\left| \int_E \varphi_k(\zeta_k) \int_0^T u_k h dt dx \right| \leq \frac{C_1 R}{M} + \frac{M R C_1 T^2}{N^2 \alpha^2} + \gamma_N M R T \mu_n(E).$$

Для произвольного $\varepsilon > 0$ возьмём M и N такими, что

$$\frac{C_1 R}{M} < \frac{\varepsilon}{3} \quad \text{и} \quad \frac{M R C_1 T^2}{N^2 \alpha^2} < \frac{\varepsilon}{3}.$$

Тогда

$$\left| \int_E \varphi_k(\zeta_k) \int_0^T u_k h dt dx \right| < \varepsilon \quad \text{при} \quad \mu_n(E) < \delta = \frac{\varepsilon}{3 \gamma_N M R T}.$$

В силу произвольности множества E , это свойство и означает, что последовательность $\{\varphi_k(\zeta_k) \int_0^T u_k h dt\}$ является равномерно абсолютно интегрируемой на Ω . Таким образом, (10), а значит и обобщённая разрешимость задачи (1)–(3), доказаны.

ШАГ 4. Для завершения доказательства теоремы (1) нам осталось установить справедливость оценок (4) и (5). Используя слабую полунепрерывность снизу норм в банаховых пространствах и теорему Фату, эти оценки легко получить из (7) и (9) соответственно.

Теорема 1 доказана.

References

- [1] V. N. Starovoitov, B. N. Starovoitova, *Modeling the dynamics of polymer chains in water solution. Application to sensor design*, Journal of Physics: Conference series, **894** (2017), 012088.
- [2] V. N. Starovoitov, *Solvability of boundary value problem of chaotic dynamics of polymer molecule in the case of bounded interaction potential*, Siberian Electronic Mathematical Reports, **18**:2 (2021), 1714–1719.
- [3] V. N. Starovoitov, *Initial boundary value problem for a nonlocal in time parabolic equation*, Siberian Electronic Mathematical Reports, **15** (2018), 1311–1319.
- [4] V. N. Starovoitov, *Boundary value problem for a global-in-time parabolic equation*, Mathematical Methods in the Applied Sciences, **44**:1 (2021), 1118–1126.
- [5] V. N. Starovoitov, *Weak solvability of a boundary value problem for a parabolic equation with a global-in-time term that contains a weighted integral*, Journal of Elliptic and Parabolic Equations, **7**:2 (2021), 623–634.
- [6] C. Walker, *Strong solutions to a nonlocal-in-time semilinear heat equation*, Quart. Appl. Math., **79** (2021), 265–272.
- [7] J. D. Djida, G. F. F. Gounoue, Y. K. Tchaptchie, *Nonlocal complement value problem for a global in time parabolic equation*, Journal of Elliptic and Parabolic Equations, **8** (2022), 767–789.
- [8] C. Walker, *A remark on a nonlocal-in-time heat equation*, Comptes Rendus. Mathématique. **361**:G4 (2023), 825–831.
- [9] L. C. Evans, *Partial differential equations*, Graduate Studies in Mathematics. V. 19. American Mathematical Society, 2010.
- [10] B. Makarov, A. Podkorytov, *Real analysis: measures, integrals and applications*, Springer Science & Business Media, 2013.

VICTOR N. STAROVOITOV
LAVRENTYEV INSTITUTE OF HYDRODYNAMICS,
PR. LAVRENTYEVA, 15,
630090, NOVOSIBIRSK, RUSSIA
Email address: starovoitov@hydro.nsc.ru