Разрешимость краевой задачи о хаотичной динамике полимерной молекулы в случае ограниченного потенциала взаимодействия *

В. Н. Старовойтов

Институт гидродинамики им. М. А. Лаврентьева СО РАН

E-mail: starovoitov@hydro.nsc.ru

Аннотация

This paper deals with a boundary value problem for a parabolic differential equation that describes a chaotic motion of a polymer chain in water. The equation is nonlocal in time as well as in space. It includes a so called interaction potential that depends on the integrals of the solution over the entire time interval and over the space domain where the problem is being solved. The time nonlocality appears since each segment of the chain interacts with all others through the surrounding fluid. The weak solvability of the problem is proven for the case of the bounded continuous interaction potential. The proof does not use any continuity properties of the solution with respect to time and is based on the energy estimate only.

Key words: nonlocal parabolic equation, initial boundary value problem, solvability

2010 Mathematics Subject Classification: 35K58, 35Q92

1 Введение

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

$$\partial_t u - \Delta u + \varphi\Big(\int_0^T \varrho(\cdot, t)\, dt\Big)\, u = 0, \tag{1.1}$$

$$\varrho(x, t) = \frac{u(x, t)}{\int_\Omega u(x, t)\, dx},$$

$$u(x, 0) = u_0(x), \tag{1.2}$$

$$u(x, t) = 0 \quad \text{при} \quad x \in \partial\Omega, \tag{1.3}$$

*Работа поддержана Российским научным фондом (проект № 19-11-00069).

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

Данная задача возникла в [1] при моделировании динамики полимерной молекулы (цепочки) в водном растворе. 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 $\varrho = \varrho(x, t)$ представляет собой распределение плотности вероятности того, что t-е звено цепочки находится в точке $x \in \Omega$. Таким образом, хотя система (1.1)–(1.3) выглядит как нестационарная параболическая задача, физически она является стационарной и описывает усреднённое по времени состояние полимерной молекулы.

По своему смыслу функция ϱ должна быть неотрицательной, поэтому и решение задачи u необходимо искать в классе неотрицательных функций. Функция u связана с ϱ нормировочным условием, выписанным после уравнения (1.1). Его наличие связано с тем, что пространственный интеграл от ϱ представляет собой вероятность того, что каждое звено цепи находится в области Ω, и поэтому должен быть равен единице.

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. Поскольку $\varrho \geq 0$, функция φ должна быть определена на $\mathbb{R}_+ = [0, +\infty)$. В данной работе мы будем предполагать, что φ является ограниченной непрерывной функцией. Кроме того, при математическом исследовании задачи можно предположить, что эта функция является неотрицательной. В самом деле, предположим, что $\varphi(\xi) \geq -K$ для некоторого положительного числа K и всех $\xi \in \mathbb{R}_+$. Если u есть решение задачи (1.1)–(1.3), то $\bar{u}(x, t) = e^{-Kt}\, u(x, t)$ является решением следующей задачи:

$$\partial_t \bar{u} - \Delta \bar{u} + \bar{\varphi}\Big(\int_0^T \bar{\varrho}(\cdot, t)\, dt \Big)\, \bar{u} = 0, \quad \bar{u}|_{\partial\Omega} = 0, \quad \bar{u}|_{t=0} = u_0,$$

где $\bar{\varphi} = \varphi + K$ и $\bar{\varrho}(x, t) = \bar{u}(x, t) / \int_\Omega \bar{u}(x, t)\, dx$. То есть мы имеем точно такую же задачу, но с неотрицательным потенциалом $\bar{\varphi}$. В дальнейшем мы будем предполагать, что φ является неотрицательной функцией.

Несмотря на довольно простой вид уравнения (1.1), решение краевой задачи (1.1)–(1.3) связано с преодолением нескольких математических сложностей. Во-первых, 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 решение обычно 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 данной трудности (см. [2, 3, 4, 5, 6, 7]). Ещё одна сложность связана с нормировкой, которая предполагает деление решения на интеграл от него по области Ω. То есть данный интеграл не должен обращаться в нуль на множестве положительной одномерной меры Лебега в $[0,T]$. В представленной работе для случая ограниченного потенциала взаимодействия удалось получить оценку снизу на этот интеграл, что позволило доказать обобщённую разрешимость задачи для произвольного $T>0$. В случае неограниченного потенциала задача требует более серьезного анализа.

2 Разрешимость задачи

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 2.1. Пусть $\varphi:\mathbb{R}_+\to\mathbb{R}_+$ — непрерывная функция, $T\in(0,\infty)$, $u_0\in L^2(\Omega)$ и $u_0\geq 0$. Функцию $u:\Omega_T\to\mathbb{R}_+$ назовём обобщённым решением задачи (1.1)–(1.3), если

1. $u\in L^2(0,T;H_0^1(\Omega))$ и $\varphi(\zeta)\,u\in L^1(\Omega_T)$, где $\zeta(x)=\int_0^T\big(u(x,t)/\int_\Omega u(x,t)\,dx\big)\,dt$;
2. интегральное тождество

$$\int_0^T\int_\Omega\big(u\,\partial_t h-\nabla u\cdot\nabla h-\varphi(\zeta)\,u\,h\big)\,dx\,dt+\int_\Omega u_0h_0\,dx=0$$

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

Прежде чем перейти к формулировке и доказательству основного результата данной работы об обобщённой разрешимости задачи (1.1)–(1.3), установим справедливость одной вспомогательной леммы, в которой получена оценка снизу для $\int_\Omega v(x,\cdot)\,dx$, где $v:\Omega_T\to\mathbb{R}$ есть обобщённое решение следующей задачи:

$$\partial_t v-\Delta v+\eta\,v=0\quad\text{в}\quad\Omega_T,\quad v|_{\partial\Omega}=0,\quad v|_{t=0}=v_0,\tag{2.1}$$

и $\eta:\Omega_T\to\mathbb{R}_+$ — ограниченная функция. Очевидно, что эта задача имеет единственное обобщённое решение, которое определяется также, как в определении 2.1 (см. [8]).

Обозначим через λ_* первое собственное значение и через ψ_* соответствующую ему собственную функцию оператора Лапласа $(-\Delta)$ в области Ω с однородным краевым условием Дирихле на $\partial\Omega$. Хорошо известно (см., например, [8, Sec. 6.5.1]), что $\lambda_*>0$ и $\psi_*>0$ в Ω.

Лемма 2.2. *Пусть* $v_0\in L^2(\Omega)$, $v_0\geq 0$, $\eta\in L^\infty(\Omega_T)$ *и* $0\leq\eta\leq K$ *почти всюду в* Ω_T *для некоторого* $K>0$. *Для каждого* $t\in[0,T]$ *обобщённое решение задачи* (2.1) *удовлетворяет следующему неравенству:*

$$\int_\Omega v(x,t)\,\psi_*(x)\,dx\geq e^{-(\lambda_*+K)t}\int_\Omega v_0(x)\,\psi_*(x)\,dx.\tag{2.2}$$

Как следствие, если $\int_\Omega v_0(x)\,dx > 0$, *то существует положительная постоянная* C_*, *такая что*

$$\int_\Omega v(x,t)\,dx \ge C_* \quad \text{для всех} \quad t \in [0,T]. \tag{2.3}$$

Постоянная C_* *зависит от* v_0, Ω, T *и* K.

$\triangleright$ Докажем лемму для гладких функций v_0 и η. В общем случае утверждение легко может быть доказано с помощью регуляризации и предельного перехода. Сначала отметим, что $v \ge 0$ вследствие принципа максимума. Поэтому

$$\frac{d}{dt}\int_\Omega v\,\psi_*\,dx = \int_\Omega \partial_t v\,\psi_*\,dx = \int_\Omega (v\,\Delta\psi_* - \eta\,v\,\psi_*)\,dx$$
$$= \int_\Omega (-v\,\lambda_*\,\psi_* - \eta\,v\,\psi_*)\,dx \ge -(\lambda_* + K)\int_\Omega v\,\psi_*\,dx.$$

Из этого неравенства следует (2.2). Оценка (2.3) следует из (2.2), поскольку мы можем взять такую собственную функцию ψ_*, что $\psi_* \le 1$, а для неё справедливо неравенство $\int_\Omega v\,dx \ge \int_\Omega v\,\psi_*\,dx$. $\triangleleft$

Основным результатом данной работы является следующее утверждение.

Теорема 2.3. *Предположим, что* $T \in (0,\infty)$, $u_0 \in L^2(\Omega)$, $u_0 \ge 0$, $\int_\Omega u_0\,dx > 0$ *и* $\varphi : \mathbb{R}_+ \to \mathbb{R}_+$ — *непрерывная функция, такая что* $0 \le \varphi(\xi) \le K$ *для всех* $\xi \in \mathbb{R}_+$ *и некоторого* $K > 0$. *Тогда существует обобщённое решение* $u \in L^\infty(0,T;L^2(\Omega)) \cap L^2(0,T;H_0^1(\Omega))$ *задачи* (1.1)–(1.3), *такое что* $u \ge 0$, $\partial_t u \in L^2(0,T;H^{-1}(\Omega))$, $u \in C(0,T;L^2(\Omega))$,

$$\frac{1}{2}\,\|u(\cdot,t)\|^2 + \int_0^t \|\nabla u(\cdot,s)\|^2\,ds + \int_\Omega \varphi(\zeta)\,u^2(\cdot,t)\,dx \le \frac{1}{2}\,\|u_0\|^2 \tag{2.4}$$

и $\int_\Omega u(x,t)\,dx > 0$ *для всех* $t \in [0,T]$, *где* $\zeta(x) = \int_0^T \big(u(x,t)/\int_\Omega u(x,t)\,dx\big)\,dt$.

Доказательство. Для доказательства разрешимости задачи применим теорему Шаудера о неподвижной точке. Пусть B_R — замкнутый шар в пространстве $L^1(\Omega)$ с центром в нуле и радиуса R. Число R будет определено позднее. Определим отображение $\Psi : B_R \to B_R$, о котором говорится в теореме Шаудера. Для каждого $w \in B_R$ обозначим через u_w обобщённое решение следующей задачи:

$$\partial_t u_w - \Delta u_w + \varphi(w)\,u_w = 0, \quad u_w|_{\partial\Omega} = 0, \quad u_w|_{t=0} = u_0. \tag{2.5}$$

Из классической теории параболических уравнений (см., например, [8, Ch. 7]) следует, что эта задача имеет единственное обобщённое решение. Положим

$$\Psi(w) = \int_0^T \varrho_w(\cdot,t)\,dt, \quad \varrho_w = \frac{u_w}{\int_\Omega u_w\,dx}.$$

Если некоторая функция w является неподвижной точкой отображения Ψ, то, как нетрудно видеть, u_w — обобщённое решение задачи (1.1)–(1.3). Таким образом, согласно теореме Шаудера необходимо доказать, что $\Psi(B_R) \subset B_R$ для некоторого $R > 0$ и $\Psi : B_R \to L^1(\Omega)$ — непрерывное компактное отображение.

Из принципа максимума для задачи (2.5) следует, что $u_w \geq 0$. Кроме того, в силу леммы 2.2 существует такая постоянная C_*, что $\int_\Omega u_w(x,t)\,dx \geq C_* > 0$ для всех $t \in [0,T]$. Поэтому $\|\varrho_w(\cdot,t)\|_{L^1(\Omega)} = \int_\Omega \varrho_w(x,t)\,dx = 1$ для всех $t \in [0,T]$ и справедлива оценка:

$$\|\Psi(w)\|_{L^1(\Omega)} \leq \int_0^T \|\varrho_w\|_{L^1(\Omega)}\,dt = T.$$

Таким образом, если мы возьмём $R = T$, то получим, что $\Psi(B_R) \subset B_R$.

Докажем непрерывность отображения Ψ. Энергетическая оценка для задачи (2.5) имеет следующий вид:

$$\frac{1}{2}\,\|u_w(\cdot,t)\|^2 + \int_0^t \|\nabla u_w(\cdot,s)\|^2\,ds + \int_\Omega \varphi(w)\,u_w^2(\cdot,t)\,dx \leq \frac{1}{2}\,\|u_0\|^2 \tag{2.6}$$

для почти всех $t \in [0,T]$. Возьмём теперь произвольную последовательность $\{w_k\}$ в B_R, которая сходится в $L^1(\Omega)$ к некоторой функции $w \in B_R$. Тогда $w_k \to w$ по мере (Лебега) на Ω и в силу теоремы Лебега о предельном переходе под знаком интеграла $\varphi(w_k) \to \varphi(w)$ в $L^p(\Omega)$ для всех $p \in [1,\infty)$. Разность $u_{w_k} - u_w$ является обобщённым решением следующей задачи:

$$\partial_t(u_{w_k} - u_w) - \Delta(u_{w_k} - u_w) + \varphi(w)\,(u_{w_k} - u_w) + \big(\varphi(w_k) - \varphi(w)\big)\,u_{w_k} = 0,$$
$$(u_{w_k} - u_w)|_{\partial\Omega} = 0, \quad (u_{w_k} - u_w)|_{t=0} = 0.$$

Поэтому для неё справедлива энергетическая оценка:

$$\operatorname*{ess\,sup}_{t\in[0,T]} \|(u_{w_k} - u_w)(\cdot,t)\|^2 + \int_0^T \|\nabla(u_{w_k} - u_w)(\cdot,s)\|^2\,ds \leq c_k,$$

где

$$c_k = \frac{3}{2}\Big(\int_0^T \|\big(\varphi(w_k) - \varphi(w)\big)\,u_{w_k}(\cdot,s)\|\,ds\Big)^2.$$

Как следует из оценки (2.6) и теорем вложения,

$$\int_0^T \|u_{w_k}(\cdot,s)\|^2_{L^q(\Omega)}\,ds \leq C$$

для всех $k \in \mathbb{N}$ и некоторой независящей от k постоянной C, где $q = 2n/(n-2)$ при $n > 2$ и $q = \infty$ при $n = 2$. Поскольку, в силу неравенства Гёльдера,

$$\int_0^T \|\big(\varphi(w_k) - \varphi(w)\big)\,u_{w_k}(\cdot,s)\|\,ds \leq \|(\varphi(w_k) - \varphi(w)\|_{L^p(\Omega)} \int_0^T \|u_{w_k}(\cdot,s)\|_{L^q(\Omega)}\,ds,$$

где $p = 2q/(q-2)$, мы получаем, что $c_k \to 0$ и, как следствие, $\operatorname{ess\,sup}_{t\in[0,T]} \|(u_{w_k} - u_w)(\cdot,t)\| \to 0$ при $k \to \infty$. Поэтому

$$\operatorname*{ess\,sup}_{t\in[0,T]} \Big|\int_\Omega (u_{w_k} - u_w)(\cdot,t)\,dx\Big| \to 0 \quad \text{as} \quad k \to \infty$$

для почти всех $t \in [0,T]$. Отсюда, поскольку $\int_\Omega u_w(\cdot,t)\,dx \geq C_*$ и $\int_\Omega u_{w_k}(\cdot,t)\,dx \geq C_*$ для всех $k \in \mathbb{N}$ и $t \in [0,T]$, несложно вывести, что $\Psi(w_k) \to \Psi(w)$ в $L^1(\Omega)$ при $k \to \infty$. Таким образом, отображение Ψ является непрерывным на B_R.

Остаётся доказать компактность Ψ. Пусть $\{w_k\}$ — произвольная последовательность в B_R. Необходимо показать, что существует такая её подпоследовательность $\{w_{k'}\}$, что $\Psi(w_{k'})$ сходится в $L^1(\Omega)$. Согласно оценке (2.6), последовательность $\{u_{w_k}\}$ является ограниченной в $L^2(0,T;H_0^1(\Omega))$. Поэтому, в силу леммы 2.2, последовательность $\{\nabla\varrho_{w_k}\}$ ограничена в $L^2(\Omega_T)$ и, как следствие, последовательность $\{\nabla\Psi(w_k)\}$ ограничена в $L^2(\Omega)$. Поскольку $H^1(\Omega)$ компактно вкладывается в $L^2(\Omega)$, существует подпоследовательность $\{\Psi(w_{k'})\}$, которая сходится в $L^2(\Omega)$. Таким образом, отображение $\Psi : B_R \to B_R$ является компактным.

Итак, все условия теоремы Шаудера выполнены и существует $w \in L^1(\Omega)$, такое что $\Psi(w) = w$. Тогда $u = u_w$ является обобщённым решением задачи (1.1)–(1.3). Заметим, что при этом $w = \zeta = \int_0^T \big(u(x,t)/\int_\Omega u(x,t)\,dx\big)\,dt$, и выполнение энергетической оценки (2.4) для почти всех $t \in [0,T]$ следует из (2.6). Она будет справедлива для всех t, если $u \in C(0,T;L^2(\Omega))$. Этот факт элементарно следует из того, что $\partial_t u \in L^2(0,T;H^{-1}(\Omega))$ (см. [8]), а это, в свою очередь, вытекает из ограниченности функции φ. Неотрицательность решения u следует из принципа максимума, а тот факт, что $\int_\Omega u(x,t)\,dx > 0$ для всех $t \in [0,T]$ является следствием леммы 2.2. Теорема доказана. $\square$

Список литературы

[1] Starovoitov V.N., Starovoitova B.N. Modeling the dynamics of polymer chains in water solution. Application to sensor design. *Journal of Physics: Conference series*, 2017, V. 894, P.n. 012088. https://doi.org/10.1088/1742-6596/894/1/012088

[2] Lyubanova A.Sh. On nonlocal problems for systems of parabolic equations. *J. Math. Anal. Appl.*, 2015, V. 421, Issue 2, P. 1767–1778. https://doi.org/10. 1016/j.jmaa.2014.08.027

[3] Starovoitov V.N. Initial boundary value problem for a nonlocal in time parabolic equation. *Siberian Electronic Mathematical Reports*, 2018, V. 15, P. 1311–1319.

[4] Starovoitov V.N. Boundary value problem for a global-in-time parabolic equation. *Mathematical Methods in the Applied Sciences*, 2021, V. 44, No. 1, P. 1118-1126. https://doi.org/10.1002/mma.6816

[5] Walker C. Strong solutions to a nonlocal-in-time semilinear heat equation. *Quart. Appl. Math.*, 2021, V. 79, P. 265-272. https://doi.org/10.1090/qam/1579

[6] Djida J.D., Gounoue G.F.F., Tchaptchie Y.K. A global in time parabolic equation for symmetric Lévy operators. arXiv preprint arXiv:2102.07278. – 2021.

[7] Starovoitov V.N. 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*, 2021. https://doi.org/10.1007/s41808-021-00103-2

[8] Evans L.C. Partial differential equations. Graduate Studies in Mathematics. V. 19. American Mathematical Society, 1998.