S©MR

СИБИРСКИЕ ЭЛЕКТРОННЫЕ
МАТЕМАТИЧЕСКИЕ ИЗВЕСТИЯ
Siberian Electronic Mathematical Reports
http://semr.math.nsc.ru
ISSN 1813-3304

Том 20, № 2, стр. 1597–1604 (2023) УДК 517.956.4
https://doi.org/10.33048/semi.2023.20.098 MSC 35K58, 35Q92

РАЗРЕШИМОСТЬ РЕГУЛЯРИЗОВАННОЙ КРАЕВОЙ ЗАДАЧИ О ХАОТИЧНОЙ ДИНАМИКЕ ПОЛИМЕРНОЙ МОЛЕКУЛЫ

В. Н. Старовойтов

Представлено О.С. Розановой

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.

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

Поступила 12 ноября 2023 г., опубликована 29 декабря 2023 г.

рассмотрим следующую краевую задачу:

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

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

$$u(x,0) = u_0(x), \tag{2}$$

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

где $x = (x_1,\dots,x_n)$ — 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, 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 $\varrho = u/I_\alpha(u)$ 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 $\varphi : \mathbb{R}_+ \to \mathbb{R}_+$ — непрерывная функция, $T \in (0, \infty)$, $\alpha > 0$, $u_0 \in L^2(\Omega)$ и $u_0 \geq 0$. Функцию $u : \Omega_T \to \mathbb{R}_+$ 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*

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

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 $T \in (0, \infty)$, $\varphi : \mathbb{R}_+ \to \mathbb{R}_+$ — 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:*

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

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

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

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 $\varphi(\xi) \le K$ 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:

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

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

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

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:

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

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 $k\to\infty$ в равенстве (6). Ясно, что

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

Единственная проблема заключается в доказательстве того, что

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

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 сходимость в каком-нибудь $L^p(\Omega_T)$ (или даже $H^m(\Omega_T)$) или сходимость 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

$$\int_{\Omega_T}t\,|\partial_t u_k(x,t)|^2\,dxdt \\ +\frac{1}{2}\operatorname*{ess\,sup}_{t\in[0,T]}\Big(t\,\|\nabla u_k(\cdot,t)\|^2+t\int_\Omega\varphi_k(\zeta_k(x))\,u_k^2(x,t)\,dx\Big) \\ \le\frac{1}{2}\int_{\Omega_T}\big(|\nabla u_k(x,t)|^2+\varphi_k(\zeta_k(x))\,u_k^2(x,t)\big)\,dx\,dt\le\frac{1}{4}\,\|u_0\|^2. \quad (9)$$

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

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

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

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 $\varphi_k(\zeta_k) \to \varphi(\zeta)$ при $k \to \infty$ почти всюду в Ω. В самом деле, обозначим через D множество точек $x \in \Omega$, таких что $\zeta_k(x) \to \zeta(x)$ при $k \to \infty$. 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 $\varphi_k(\zeta_k(x)) = \varphi(\zeta_k(x)) \to \varphi(\zeta(x))$ при $k \to \infty$ для всех $x \in D$.

Таким образом,

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

и согласно теореме Витали для доказательства (10) осталось установить, что последовательность $\{\varphi_k(\zeta_k) \int_0^T u_k\, h\, dt\}$ является равностепенно 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

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

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

$$\int_\Omega \varphi_k(\zeta_k(x))\zeta_k^2(x)\,dx \le \frac{T}{\alpha^2}\int_0^T\int_\Omega \varphi_k(\zeta_k(x))u_k^2(x,t)\,dx\,dt \le \frac{C_1T}{\alpha^2}.$$

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

$$\int_{E_N^k} \varphi_k(\zeta_k)\,dx \le \frac{1}{N^2}\int_{E_N^k}\varphi_k(\zeta_k)\zeta_k^2\,dx \le \frac{C_1T}{N^2\alpha^2}.$$

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

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

Таким образом,

$$\int_E \varphi_k(\zeta_k)\,dx \le \frac{C_1T}{N^2\alpha^2} + \gamma_N\mu_n(E).$$

Подставляя эту оценку в (11), мы получим

$$\Big|\int_E \varphi_k(\zeta_k)\int_0^T u_k\,h\,dt\,dx\Big| \le \frac{C_1R}{M} + \frac{MRC_1T^2}{N^2\alpha^2} + \gamma_N MRT\mu_n(E).$$

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

$$\frac{C_1R}{M} < \frac{\varepsilon}{3} \quad \text{и} \quad \frac{MRC_1T^2}{N^2\alpha^2} < \frac{\varepsilon}{3}.$$

Тогда

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

В силу произвольности множества E, это свойство и означает, что последовательность $\{\varphi_k(\zeta_k)\int_0^T u_k\,h\,dt\}$ является равностепенно 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*, J. Phys.: Conf. Ser., **894** (2017), Article ID 012088.

[2] V.N. Starovoitov, *Solvability of a boundary value problem of chaotic dynamics of polymer molecule in the case of bounded interaction potential*, Sib. Èlektron. Mat. Izv., **18**:2 (2021), 1714–1719. Zbl 1491.35276

[3] V.N. Starovoitov, *Initial boundary value problem for a nonlocal in time parabolic equation*, Sib. Èlektron. Mat. Izv., **15** (2018), 1311–1319. Zbl 1401.35198

[4] V.N. Starovoitov, *Boundary value problem for a global-in-time parabolic equation*, Math. Methods Appl. Sci., **44**:1 (2021), 1118–1126. Zbl 1469.35124

[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*, J. Elliptic Parabol. Equ., **7**:2 (2021), 623–634. Zbl 1479.35906

[6] C. Walker, *Strong solutions to a nonlocal-in-time semilinear heat equation*, Q. Appl. Math., **79**:2 (2021), 265–272. Zbl 1461.35131

[7] J.-D. Djida, G.F. Foghem Gounoue, Y.K. Tchaptchié, *Nonlocal complement value problem for a global in time parabolic equation*, J. Elliptic Parabol. Equ., **8**:2 (2022), 767–789. Zbl 1501.35130

[8] C. Walker, *A remark on a nonlocal-in-time heat equation*, C. R., Math., Acad. Sci. Paris, **361** (2023), 825–831. Zbl 1514.35270

[9] L.C. Evans, *Partial differential equations*, Graduate Studies in Mathematics, **19**, American Mathematical Society, Providence, 2010. Zbl 1194.35001

[10] B. Makarov, A. Podkorytov, *Real analysis: measures, integrals and applications*, Springer, London, 2013. Zbl 1279.28002

Victor N. Starovoitov
Lavrentyev Institute of Hydrodynamics,
pr. Lavrentyeva, 15,
630090, Novosibirsk, Russia
Email address: starovoitov@hydro.nsc.ru