# Коэффициентная обратная задача о хаотичной динамике полимерной молекулы

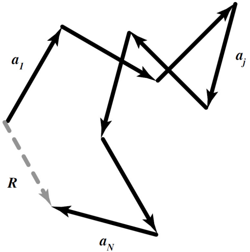
**В. Н. Старовойтов**

Институт гидродинамики им. М. А. Лаврентьева СО РАН
Новосибирск 630090
E-mail: starovoitov@hydro.nsc.ru

Конференция
«Уравнения с частными производными и их приложения»
07 – 09 октября 2024 года
Институт математики им. С. Л. Соболева СО РАН, Новосибирск

# Динамика полимерной цепочки в жидкости

## Идеальные цепи




Идеальная цепь — это набор отрезков $\boldsymbol{a}_i$, $i = 1, \ldots, N$, одинаковой длины $a$, соединённых шарнирами. Пусть $\boldsymbol{R} = \sum_{i=1}^{N} \boldsymbol{a}_i$.

Распределение плотности вероятности величины $\boldsymbol{R}$ для $N \gg 1$ близко к гауссову:

$$P_N(\boldsymbol{R}) = \left(2\pi N a^2/3\right)^{-3/2} \exp\left(-3\boldsymbol{R}^2/(2Na^2)\right).$$


А. Ю. Гросберг, А. Р. Хохлов. Статистическая физика макромолекул. «Наука», 1989.

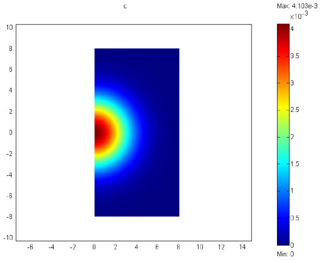
Пусть $p(\boldsymbol{x},t)$ — решение задачи:

$$\frac{\partial p}{\partial t} - \frac{a^2}{6}\Delta p = 0, \qquad p(\boldsymbol{x},0) = \delta(\boldsymbol{x}),$$

$\delta(\boldsymbol{x})$ — функция Дирака, сосредоточенная в нуле.
Нетрудно заметить, что

$$P_N(\boldsymbol{R}) = p(\boldsymbol{R},N).$$

То есть распределение плотности вероятности с большой точностью совпадает с фундаментальным решением уравнения теплопроводности, в котором роль времени играет параметр длины дуги вдоль цепочки (номер звена в цепочке).
Для случая $a = 0,4$ функция $p(\boldsymbol{x},100)$ (т.е., $N = 100$) изображена на рисунке.

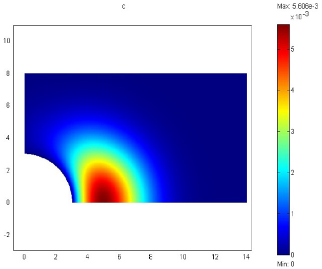


## Учёт внешних сил

Если на цепочку действует внешняя сила с потенциалом $\varphi$, то для определения распределения плотности вероятности мы должны решить задачу:

$$\frac{\partial q}{\partial t} - \frac{a^2}{6}\Delta q + \varphi q = 0, \qquad q(\boldsymbol{x},0) = \delta(\boldsymbol{x}), \quad p = \frac{q}{\int q\,d\boldsymbol{x}}$$

Например, если движение цепочки ограничено телом $B$, то




$$\varphi(\boldsymbol{x}) = \begin{cases} 0, & \boldsymbol{x} \notin B, \\ +\infty, & \boldsymbol{x} \in B. \end{cases}$$

На рисунке изображены расчёты для случая, когда $B$ — шар радиуса 3. Заметим, что максимум функции $p$ сместился вправо от точки $(3,0,0)$, где закреплено начало цепочки.

## Реальные цепи

Вообще говоря, звенья цепи имеют ненулевой объём. Кроме того, они взаимодействуют друг с другом. Пусть $\rho(\boldsymbol{x}) = \sum_{k=1}^{N} P_k(\boldsymbol{x})$ — плотность распределения звеньев в пространстве. $P_k(\boldsymbol{x})$ — плотность вероятности того, что $k$-е звено находится в точке $\boldsymbol{x}$. Предположим, что каждое звено создаёт вокруг себя энергетическое поле. На каждое звено действуют все другие звенья через окружающую жидкость (потенциал силы взаимодействия $\Phi(\rho)$), а также внешняя сила с потенциалом $\varphi(\boldsymbol{x})$. Тогда

$$\frac{\partial q}{\partial t} - \frac{a^2}{6}\,\Delta q + (\Phi(\rho) + \varphi(\boldsymbol{x}))q = 0,$$

$$\rho(\boldsymbol{x}) = \int_0^N p(\boldsymbol{x},t)\,dt, \quad p(\boldsymbol{x},t) = \frac{q(\boldsymbol{x},t)}{\int q(\boldsymbol{x},t)\,d\boldsymbol{x}}.$$

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

# Математическая задача

$\Omega \subset \mathbb{R}^n$, $n \geq 2$, $T > 0$. В $\Omega_T = \Omega \times (0,T)$ требуется найти решение задачи:

$$\partial_t q - \Delta q + \varphi\Big(\int_0^T \rho(\cdot,t)\,dt\Big)\,q = 0,$$

$$\rho(x,t) = \frac{q(x,t)}{\int_\Omega q(x,t)\,dx},$$

$$q(x,0) = q_0(x), \quad q(x,t) = 0 \quad \text{при} \quad x \in \partial\Omega.$$

$\varphi : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ — потенциал взаимодействия, время $t$ соответствует длине дуги вдоль цепочки, $\rho(x,t)$ — плотность вероятности того, что $t$-е звено цепи находится в точке $x$. Поскольку каждое звено взаимодействует со всеми другими через окружающую жидкость, уравнение содержит член с интегралом от $\rho$ по всей длине цепочки, т. е. от $0$ до $T$, $T$ — длина цепочки.

## *Разрешимость задачи*

В. Н. Старовойтов. Разрешимость краевой задачи о хаотичной динамике полимерной молекулы в случае ограниченного потенциала взаимодействия// Сибирские электронные математические известия, 2021, Т. 18, № 2, С. 1714–1719.

В. Н. Старовойтов. Разрешимость регуляризованной краевой задачи о хаотичной динамике полимерной молекулы// Сибирские электронные математические известия, 2023, Т. 20, № 2, С. 1597–1604.

V. N. Starovoitov. Problem of chaotic dynamics of polymer chain with a partly bounded interaction potential// Journal of Elliptic and Parabolic Equations (submitted)

# Формулировка в виде обратной задачи

Изменение искомой функции с $q$ на $\rho$. Так как $\rho(x,t) = \frac{q(x,t)}{\int_\Omega q(x,t)\,dx}$

$$\partial_t q = \int_\Omega q\,dx\,\partial_t\rho + \rho\,\partial_t \int_\Omega q\,dx.$$

$\Longrightarrow$ Уравнение для $\rho$:

$$\partial_t\rho - \Delta\rho + \varphi\Big(\int_0^T \rho(\cdot,t)\,dt\Big)\rho + \rho\,\partial_t \log \int_\Omega q\,dx = 0.$$

$\Longrightarrow$ Обратная задача *AD* для $u = u(x,t)$, $\lambda = \lambda(t)$:

$$\partial_t u - \Delta u + \varphi\Big(\int_0^T u(x,s)\,ds\Big)u - \lambda\,u = 0, \quad (x,t)\in\Omega_T,$$

$$\int_\Omega u(x,t)\,dx = 1, \quad t\in[0,T],$$

$$u(x,0) = u_0(x), \quad x\in\Omega,$$

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

Во многих работах по обратным задачам предполагается выполненными масса условий на коэффициенты уравнения, на начальные данные и др., что диктуется невозможностью провести доказательство разрешимости в более общем случае. Например, условие переопределения записывают с весовой функцией под интегралом, которая обращается в нуль на границе $\partial\Omega$. Такая постановка очень помогает при рассмотрении задачи Дирихле и визуально не сильно отличается от нашей. Однако наша постановка задачи возникла при описании конкретного физического процесса, а именно, хаотичной динамики полимерной цепочки в жидкости.

## *Некоторые близкие работы*


A. I. Prilepko, D. G. Orlovsky, I. A. Vasin. Methods for Solving Inverse Problems in Mathematical Physics, Marcel Dekker, New York, 2000.

J. R. Cannon, Y. Lin. Determination of a parameter $p(t)$ in some quasi-linear parabolic differential equations// Inverse Problems, **4**:1 (1988), 35–45.

А. И. Кожанов. Параболические уравнения с неизвестными коэффициентами, зависящими от времени// Журнал вычислительной математики и математической физики, 2017, Т. 57, № 6, С. 961–972.

## *Обратная задача AN*

Определить $u = u(x,t)$, $\lambda = \lambda(t)$, такие что

$$\partial_t u - \Delta u + \varphi\Big(\int_0^T u(x,s)\,ds\Big)\,u - \lambda\,u = 0, \quad (x,t) \in \Omega_T,$$
$$\int_\Omega u(x,t)\,dx = 1, \quad t \in [0,T],$$
$$u(x,0) = u_0(x), \quad x \in \Omega,$$
$$\frac{\partial u}{\partial n}(x,t) = 0 \quad \text{при} \quad x \in \partial\Omega, t \in (0,T).$$

Стандартный подход: проинтегрировав уравнение для $u$ по $\Omega$, с учётом краевого условия и условия переопределения не сложно получить, что

$$\lambda(t) = \int_\Omega \varphi\Big(\int_0^T u(x,s)\,ds\Big)\,u(x,t)\,dx, \quad t \in (0,T].$$

Получим задачу $BN$:

$$\partial_t u - \Delta u + \varphi\Big(\int_0^T u(x,s)\,ds\Big)\,u - \lambda\,u = 0, \quad (x,t) \in \Omega_T,$$
$$\lambda(t) = \int_\Omega \varphi\Big(\int_0^T u(x,s)\,ds\Big)\,u(x,t)\,dx, \quad t \in (0,T],$$
$$u(x,0) = u_0(x), \quad x \in \Omega,$$
$$\frac{\partial u}{\partial n}(x,t) = 0 \quad \text{при} \quad x \in \partial\Omega, t \in (0,T).$$

Для задачи $BD$

$$\lambda(t) = \int_\Omega \Big(-\Delta u(x,t) + \varphi\Big(\int_0^T u(x,s)\,ds\Big)\,u(x,t)\Big)\,dx, \quad t \in (0,T],$$
$$u(x,t) = 0 \quad \text{при} \quad x \in \partial\Omega, t \in (0,T).$$

1-й шаг: используя принцип сжимающих отображений (книга А. И. Прилепко, Д. Г. Орловского и И. А. Васина) доказывается однозначная разрешимость линейной задачи

$$\partial_t u - \Delta u + \varphi\Big(\int_0^T w(x,s)\,ds\Big)\,u - \lambda\,w = 0, \quad (x,t) \in \Omega_T,$$

$$\lambda(t) = \int_\Omega \varphi\Big(\int_0^T w(x,s)\,ds\Big)\,u(x,t)\,dx, \quad t \in (0,T],$$

с заданной функцией $w$ и с прежними краевыми и начальными условиями. Потенциал $\varphi$ считается непрерывным и ограниченным.

2-й шаг: таким образом, на первом шаге построено отображение $\Phi$, такое что $u = \Phi(w)$. Далее показывается, что это отображение имеет неподвижную точку (теорема Шаудера).

## Другой подход: В. Н. Старовойтов, А. А. Титова

Проведём дальнейшее преобразование задачи. Заметим, что в постановке задачи $BN$ не требуется выполнения условия переопределения. Введём обозначение:

$$\mu(t) = e^{-\int_0^t \lambda(s)\,ds}, \quad v(x,t) = u(x,t)e^{-\int_0^t \lambda(s)\,ds} = \mu(t)\,u(x,t).$$

Можно показать, что

$$\mu(t) = \int_\Omega v(x,t)\,dx - \int_\Omega u_0(x)\,dx + 1.$$

В дальнейшем мы всегда будем предполагать, что $\int_\Omega u_0(x)\,dx = 1$, поэтому

$$\mu(t) = \int_\Omega v(x,t)\,dx.$$

Таким образом, приходим к задаче $CN$ для функций $v$ и $\mu$:

$$\partial_t v - \Delta v + \varphi\Big(\int_0^T \frac{v(\cdot,t)}{\mu(t)}\,dt\Big)\,v = 0,$$
$$\mu(t) = \int_\Omega v(x,t)\,dx,$$
$$v(x,0) = v_0(x), \quad x \in \Omega, \quad \mu(0) = 1,$$
$$\frac{\partial v}{\partial n}(x,t) = 0, \quad x \in \partial\Omega, \quad t \in [0,T],$$

Аналогично получается задача $CD$. В ней вместо условия Неймана стоит условие Дирихле:

$$v(x,t) = 0, \quad x \in \partial\Omega, \quad t \in [0,T].$$

## Теорема

*Предположим, что* $T \in (0,\infty)$, $v_0 \in L^2(\Omega)$, $\int_\Omega v_0\,dx > 0$, $v_0 \geq 0$ *и* $\varphi : \mathbb{R}_+ \to \mathbb{R}_+$ *— непрерывная функция, такая что* $0 \leq \varphi(\xi) \leq K$ *для всех* $\xi \in \mathbb{R}_+$ *и некоторого* $K > 0$. *Тогда существует обобщённое решение* $v \in L^\infty(0,T;L^2(\Omega)) \cap L^2(0,T;H^1(\Omega))$ *задачи* $CN$, *такое что* $v \geq 0$, $\partial_t v \in L^2(0,T;H^{-1}(\Omega))$, $v \in C(0,T;L^2(\Omega))$,

$$\frac{1}{2}\|v(\cdot,t)\|^2 + \int_0^t \|\nabla v(\cdot,s)\|^2\,ds + \int_0^t \int_\Omega \varphi(\zeta(x))\,v^2(x,s)\,dx\,ds \leq \frac{1}{2}\|v_0\|^2 \qquad (1)$$

*и*

$$\int_\Omega v(x,t)\,dx \geq C_* > 0$$

*для всех* $t \in [0,T]$, *где*

$$\zeta(x) = \int_0^T \frac{v(x,t)}{\int_\Omega v(x,t)\,dx}\,dt \quad \text{и} \quad C_* = e^{-KT}\int_\Omega v_0(x)\,dx.$$

## Теорема

*Предположим, что* $T \in (0,\infty)$, $u_0 \in L^2(\Omega)$, $\int_\Omega u_0\,dx = 1$, $u_0 \geq 0$ *и* $\varphi : \mathbb{R}_+ \to \mathbb{R}_+$ *— непрерывная функция, такая что* $0 \leq \varphi(\xi) \leq K$ *для всех* $\xi \in \mathbb{R}_+$ *и некоторого* $K > 0$. *Тогда существует обобщённое решение* $(u,\lambda)$ *задачи* $AN$, *такое что*

1. $u \geq 0$, $u \in L^\infty(0,T;L^2(\Omega)) \cap L^2(0,T;H^1(\Omega))$, $u \in C(0,T;L^2(\Omega))$,

$$\frac{1}{2}\|u(\cdot,t)\|^2 + \int_0^t \|\nabla u(\cdot,s)\|^2\,ds + \int_0^t \int_\Omega \varphi(\zeta(x))\,u^2(x,s)\,dx\,ds \leq \frac{e^{2KT}}{2}\|u_0\|^2 \qquad (2)$$

*для всех* $t \in [0,T]$, *где* $\zeta(x) = \int_0^T u(x,t)\,dt$.

2. $\lambda \in L^1(0,T)$, $\lambda \geq 0$ *и*

$$\int_0^T \lambda(t)\,dt \leq KT. \qquad (3)$$

## Некоторые моменты доказательства

Необходимо найти $u$ и $\lambda$. Положим

$$u(x,t) = \frac{v(x,t)}{\mu(t)}, \quad \mu(t) = \int_{\Omega} v(x,t)\,dx, \quad \lambda(t) = -\frac{\mu'(t)}{\mu(t)},$$

где $v$ — обобщённое решение задачи $CN$ с $v_0 = u_0$.
Заметим, что $\mu \in C[0,T]$ и $\mu(t) \geq C_* > 0$ для всех $t \in [0,T]$. Поэтому $u \in C(0,T;L^2(\Omega))$. Кроме того, $\int_{\Omega} u(x,t)\,dx = 1$ для всех $t \in [0,T]$ и $u \geq 0$ в $\Omega_T$. Для определения функции $\lambda \in L^1(0,T)$ нам требуется, чтобы $\mu' \in L^1(0,T)$.

$$\int_{\Omega_T} t\,|\partial_t v(x,t)|^2\,dx\,dt \leq \frac{1}{4}\,\|v_0\|^2 \quad \Rightarrow \quad \int_0^T t\,|\mu'(t)|^2\,dt \leq \frac{|\Omega|}{4}\,\|v_0\|^2$$

$$\Rightarrow \quad \int_0^T t\lambda^2(t)\,dt \leq C,$$

где постоянная $C$ зависит от $C_*$, $|\Omega|$ и $\|u_0\|$.

Спасибо за внимание!