

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»,
посвящённая 115-летию со дня рождения С. Л. Соболева
02 – 04 октября 2023 года
Институт математики им. С. Л. Соболева СО РАН, Новосибирск

Основная задача

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

$$\partial_t u - \Delta u + \varphi \left(\int_0^T \frac{u(\cdot, s)}{\int_{\Omega} u(x, s) dx} ds \right) u = 0, \quad u|_{\partial\Omega} = 0, \quad u|_{t=0} = u_0.$$

$\varphi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ — потенциал взаимодействия

Происхождение задачи

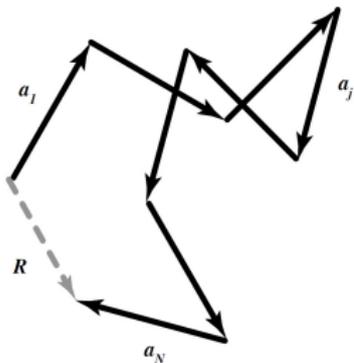
Подобная задача возникла при описании хаотичной динамики полимерной молекулы (цепочки) в водном растворе.

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>

Время t соответствует длине дуги вдоль цепочки, искомая функция $u = u(x, t)$ — 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 u по всей длине цепочки, т. е. от 0 до T , T — длина цепочки.

Идеальные цепи



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

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

$$P_N(R) = (2\pi Na^2/3)^{-3/2} \exp(-3R^2/(2Na^2)).$$

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

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

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

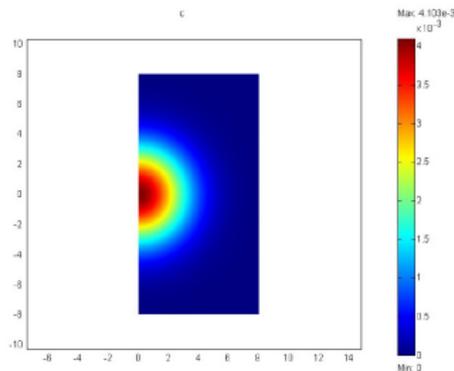
$\delta(\mathbf{x})$ — функция Дирака, сосредоточенная в нуле.

Нетрудно заметить, что

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

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 $p(\mathbf{x}, 100)$ (т.е., $N = 100$) изображена на рисунке.



Учёт внешних сил

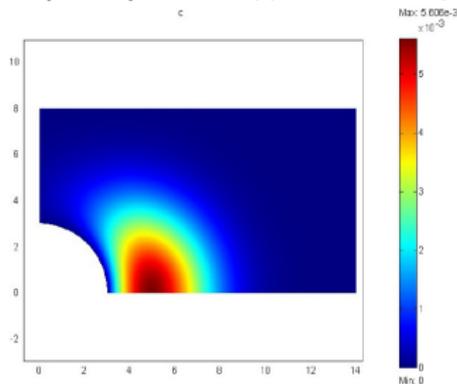
Если на цепочку действует внешняя сила с потенциалом φ , то для определения распределения плотности вероятности мы должны решить задачу:

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

Например, если движение цепочки ограничено телом B , то

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

На рисунке изображены расчеты 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

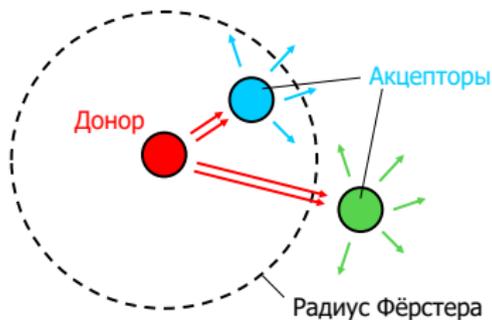
Вообще говоря, звенья цепи имеют ненулевой объем. Кроме того, они взаимодействуют друг с другом. Пусть $\rho(\mathbf{x}) = \sum_{k=1}^N P_k(\mathbf{x})$ — плотность распределения звеньев в пространстве. $P_k(\mathbf{x})$ — плотность вероятности того, что k -е звено находится в точке \mathbf{x} . Предположим, что каждое звено создает 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 $\varphi(\mathbf{x})$. Тогда

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

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

Приложение — биологический наносенсор

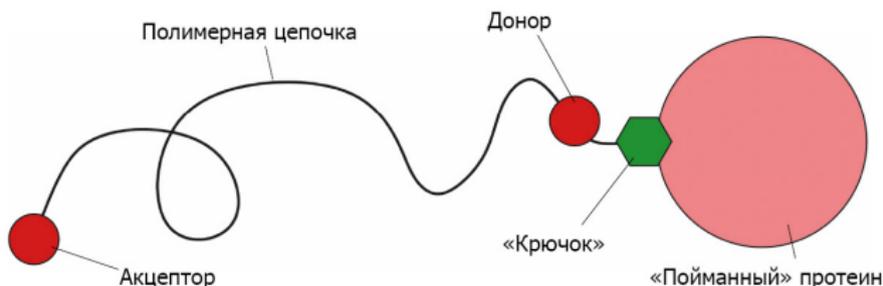
Сенсор основан на следующем принципе. Предположим, что мы имеем две флуоресцентные молекулы. Одна (донор) излучает волны определенной длины, другая (акцептор) — принимает.



Передача излучения возникает, если расстояние между молекулами не превышает так называемого радиуса Фёрстера (Förster). Сам акцептор также излучает волны, длина которых зависит от того, принимает он или нет излучение от донора. Таким образом, «цвет» излучения акцептора зависит от расстояния до донора. Если мы поместим донор и акцептор на концах полимерной цепочки, мы сможем определить, растянута цепочка или нет.

Схема наносенсора

Оснастим полимерную цепь двумя флуоресцентными молекулами по концам. Поместим также на одном конце цепи специальную атомную группу (лиганд), которая может связывать определенный протеин (или какое-либо другое соединение). Эту группу мы будем называть «крючок».



Поведение цепочки с пойманным протеином будет отличаться от поведения свободной цепочки. В частности, изменится среднее расстояние между её концами.

Численные расчеты

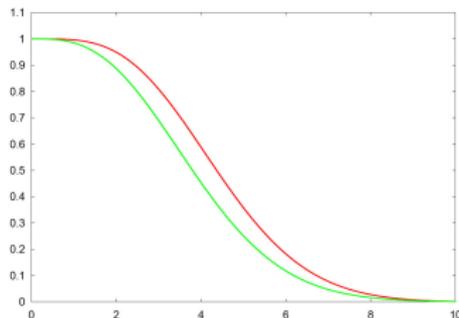
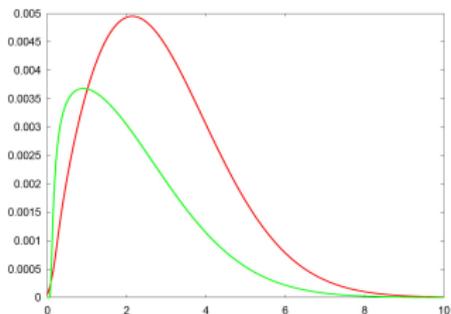
$\Phi(\rho) = -(\log(1 - \rho\nu) + 2\chi\rho\nu)$ — потенциал Флори — Хаггинса.

ν — объем звена, χ — параметр Флори.

Полимер — полиэтиленгликоль $\text{HO-CH}_2\text{-(CH}_2\text{-O-CH}_2\text{)}_n\text{-CH}_2\text{-OH}$

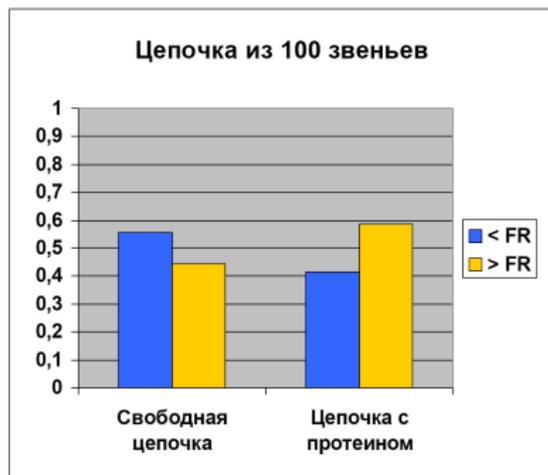
Параметры: $a = 0.6\text{ nm}$, $\nu = 0.05\text{ nm}^3$, $\chi = 0.435$, $N = 100$,

диаметр протеина 6 nm , температура 25°C .



Зеленая линия — свободная цепочка. **Красная линия** — цепочка с протеином. На первой диаграмме — плотность вероятности на отрезке $(0,0,0) - (10,0,0)$. На второй диаграмме показана часть времени, которое свободный конец цепочки проводит вне сферы радиуса r (горизонтальная ось).

Из второй диаграммы видно, что наибольшее отклонение графиков возникает при $r = 4\text{nm}$. Поэтому необходимо взять хромофоры с радиусом Фёрстера $FR = 4\text{nm}$. В этом случае мы имеем следующую диаграмму. Видим, что если цепочка «поймала» протеин, то интенсивность «жёлтого» света возрастает на 14 процентов, а «синего» — на столько же уменьшается. Этот эффект можно зарегистрировать с помощью спектрометра.



Математическая задача

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

$$\partial_t u - \Delta u + \varphi \left(\int_0^T \frac{u(\cdot, s)}{\int_{\Omega} u(x, s) dx} ds \right) u = 0, \quad u|_{\partial\Omega} = 0, \quad u|_{t=0} = u_0.$$

$\varphi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ — потенциал взаимодействия

Глобальные по времени параболические уравнения

На отрезке времени $[0, T]$ решается уравнение вида:

$$\partial_t u + Au + \varphi\left(\int_0^T u dt\right)u = f,$$

где u — искомая функция, A — эллиптический оператор, φ — некоторая функция, которая в общем случае может зависеть от t и x , f — заданная функция от t и x . Дополнительно функция u удовлетворяет начальным и граничным условиям.

Обычно рассматриваются нелокальные задачи, в которых присутствует «память», то есть интеграл вида $\int_0^t \varphi(u) dt$.

В нашей задаче для определения коэффициента требуется знать u и на отрезке $[t, T]$, то есть знать «будущее».

Нелокальные по времени задачи

Нелокальность в данных задачи.

Рассматривается параболическое уравнение, а вместо начального предполагается выполнение условия вида:

$$u(x, 0) + \varphi\left(\int_0^T u(x, s) ds\right) = g(x)$$

или

$$u(x, 0) + \sum_{k=1}^m \alpha_k u(x, t_k) = g(x), \quad t_k \in (0, T].$$

Сотни работ на эту тему, в том числе российских авторов: [В.В. Шелухин](#), [А.И. Кожанов](#), [И.В. Тихонов](#), [М.В. Уварова](#) и др.

Результат — разрешимость задачи «в малом», т. е. с ограничениями на величину данных.

[И.В. Тихонов \(1998, 2003\)](#) — однозначная разрешимость «в целом» для линейной задачи.

Нелокальность в уравнении.

Такие задачи встречаются, например, в фильтрации, в динамике популяций, в динамике полимерных молекул.

Практически нет работ.

А.И. Кожанов (2004) — $u(x, T)$ в уравнении.

А.Ш. Любанова (2015) — подобная нелокальность в уравнении, но она легко устранялась, и уравнение сводилось к обычному параболическому уравнению с нелокальными данными $u(x, T) - u(x, 0) = f(x)$ как у В.В. Шелухина.

В.Н. Старовойтов (2018, 2020) — разрешимость «в целом», единственность «в малом».

V.N. Starovoitov. 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>

C. Walker. 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>

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 (2022), No. 2, p. 767-789.

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, 2021, V. 7, No. 2, p. 623-634.

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.

C. Walker. A Remark on a Nonlocal-in-Time Heat Equation. Comptes Rendus Mathématique, 2023, V. 361, p. 825-831.

Простейшая задача с нелокальностью в уравнении

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

$$\partial_t u - \Delta u + \varphi\left(\int_0^T u(\cdot, s) ds\right) u = 0, \quad u|_{\partial\Omega} = 0, \quad u|_{t=0} = u_0.$$

Разрешимость задачи

Разделение на две задачи:

Эллиптическая задача: интегрируя уравнение по t от 0 до T , получим

$$-\Delta v + \varphi(v)v + u_T - u_0 = 0 \quad \text{в } \Omega, \quad v|_{\partial\Omega} = 0.$$

Параболическая задача: определив v , найдём u как решение задачи

$$\partial_t u - \Delta u + \varphi(v)u = 0 \quad \text{в } \Omega_T, \quad u|_{\partial\Omega} = 0, \quad u|_{t=0} = u_0.$$

Задача с весом

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

$$\partial_t u - \Delta u + \varphi\left(\int_0^T \alpha(\cdot, s) u(\cdot, s) ds\right) u = f, \quad u|_{\partial\Omega} = 0, \quad u|_{t=0} = u_0.$$

Теорема

Предположим, что $T \in (0, \infty)$, $\alpha \in L^\infty(\Omega; L^2(0, T))$, $f \in L^1(0, T; L^2(\Omega))$, $u_0 \in L^2(\Omega)$ и $\varphi: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ — неотрицательная непрерывная функция. Тогда существует слабое решение задачи $u \in L^\infty(0, T; L^2(\Omega)) \cap L^2(0, T; H_0^1(\Omega))$, такое что

$$\operatorname{ess\,sup}_{t \in [0, T]} \|u(\cdot, t)\|^2 + \int_0^T \|\nabla u(\cdot, t)\|^2 dt + \int_0^T \int_\Omega \varphi(\zeta(x)) u^2(x, t) dx dt \leq C_1,$$

$$\varphi(\zeta), \varphi(\zeta)\zeta, \varphi(\zeta)\zeta^2 \in L^1(\Omega), \quad \varphi(\zeta)u, \varphi(\zeta)u^2 \in L^1(\Omega_T),$$

где

$$\zeta = \int_0^T \alpha(\cdot, t) u(\cdot, t) dt \in L^2(\Omega).$$

Рассуждения

Шаг 1. Сначала рассматривается задача с ограниченным потенциалом φ . Метод — теорема Шаудера о неподвижной точке отображения. Ограниченность потенциала используется при доказательстве непрерывности отображения (теорема Лебега о предельном переходе под знаком интеграла).

Шаг 2. Рассматривается последовательность задач с ограниченными потенциалами $\varphi_k(\xi) = \varphi(\xi)$ при $\varphi(\xi) \leq k$ и $\varphi_k(\xi) = k$ иначе. Справедлива равномерная по k энергетическая оценка. Поэтому

$$u_k \rightarrow u \quad \text{слабо в } L^2(0, T; H_0^1(\Omega)) \text{ и } *\text{-слабо в } L^\infty(0, T; L^2(\Omega)).$$

Далее показывается, что

$$\zeta_k \rightarrow \zeta \quad \text{в } L^1(\Omega) \text{ и почти всюду в } \Omega.$$

Везде, если необходимо, выбираются подпоследовательности.

Шаг 3. Доказывается, что

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

где h — пробная функция в слабой формулировке задачи. Для этого используется теорема Витали о сходимости: показывается, что последовательность $\{\varphi_k(\zeta_k) \int_0^T u_k h dt\}$ сходится почти всюду и равномерно интегрируема на Ω .

Это позволяет осуществить предельный переход в слабой формулировке уравнения и, как следствие, доказать слабую разрешимость задачи.

Шаг 4. Доказывается справедливость энергетической оценки для предельной задачи.

Заметим, что в доказательстве использовалась только энергетическая оценка. Сильная сходимость последовательности приближённых решений $\{u_k\}$ не потребовалась.

Единственность решения

Удалось доказать единственность слабого решения только с ограничением на T .

Теорема

Предположим, что существуют такие константы K и M , что $|u_0| \leq K$ п.в. в Ω и $|\varphi'(s)| \leq M$ при $s \in [-TK, TK]$. Если $MKT^2 < 2$, то слабое решение задачи единственно.

Ещё о единственности решения задачи

Вопрос о единственности решения задачи можно свести к вопросу о тривиальности решения следующей задачи:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} + Au &= 0 \quad \text{в } \Omega_T, \\ u|_{\partial\Omega} &= 0, \quad u(x, 0) + \int_0^T \gamma(x, t) u(x, t) ds = 0, \end{aligned}$$

где $\gamma \geq 0$ и A — симметрический эллиптический оператор. Другими словами, уравнение

$$\eta + S\eta = 0$$

в $L^2(\Omega)$ должно иметь только нулевое решение. Здесь $\eta(x)$ соответствует $u(x, 0)$ и

$$S\eta = \int_0^T \gamma(\cdot, t) e^{-At} \eta dt.$$

Таким образом, необходимо показать, что -1 не принадлежит точечному спектру оператора S . Это заведомо будет так, если $\|S\| < 1$, то есть при наличии некоторого ограничения на величину T при заданной функции γ . Фактически мы получаем только локальную теорему единственности.

Заметим, что условие малости встречается во всех работах по данной тематике, где для доказательства разрешимости используются теоремы о неподвижных точках (кроме работ И. В. Тихонова (1998, 2003)). Использование этих теорем оправдано в нелинейных задачах, однако локальность получаемого решения связана не только с нелинейностью задачи.

Первый случай

Функция γ не зависит от x , т. е. $\gamma = \gamma(t)$.

И.В. Тихонов (2003, Изв. РАН) показал, что нетривиальных решений не существует, если ни одно из решений λ характеристического уравнения

$$1 + \int_0^T \gamma(t) e^{-\lambda t} dt = 0$$

не принадлежит точечному спектру оператора A . Это условие, в частности, выполнено, если A — симметрический оператор, а функция γ неотрицательна. В этом случае собственные числа оператора A являются вещественными, а характеристическое уравнение не имеет вещественных решений.

Рассуждения не годятся для γ , зависящей от x и t .

Второй случай

Функция γ имеет вид: $\gamma(x, t) = \alpha(t)\beta(x)$.

В. Н. Старовойтов (2021, Сиб. Мат. Ж.) — доказана тривиальность решения.

Рассуждения:

$S = BG$, где $G\eta = \int_0^T \alpha(t) e^{-At} \eta dt$ для всех $\eta \in L^2(\Omega)$, $\alpha \in L^1(0, T)$, $\alpha \geq 0$,

B — оператор умножения на ограниченную функцию $\beta \geq 0$.

$G > 0$, поэтому существует $E > 0$, такой что $E^2 = G$.

Лемма Якобсона $\implies \sigma(BG) \cup \{0\} = \sigma(BEE) \cup \{0\} = \sigma(EBE) \cup \{0\}$.

В силу положительности B оператор EBE тоже является положительным, откуда следует, что $\sigma(EBE) \subset [0, +\infty)$. Таким образом, $\sigma(S) = \sigma(BG) \subset [0, +\infty)$ и $-1 \notin \sigma(S)$.

Общий случай $\gamma = \gamma(x, t)$ — результатов нет.

Общая задача с ограниченным потенциалом φ

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

$$\partial_t u - \Delta u + \varphi \left(\int_0^T \rho(\cdot, t) dt \right) u = 0,$$

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

$$u(x, 0) = u_0(x), \quad u(x, t) = 0 \quad \text{при} \quad x \in \partial\Omega.$$

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.

Положительность решения

Пусть $v : \Omega_T \rightarrow \mathbb{R}$ есть обобщённое решение следующей задачи:

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

и $\eta : \Omega_T \rightarrow \mathbb{R}_+$ — ограниченная функция, $0 \leq \eta \leq K$.

Пусть λ_* — первое собственное значение и ψ_* — соответствующая ему собственная функция оператора Лапласа ($-\Delta$) в области Ω с однородным краевым условием Дирихле на $\partial\Omega$. Хорошо известно, что $\lambda_* > 0$ и $\psi_* > 0$ в Ω .

Лемма

Пусть $v_0 \in L^2(\Omega)$, $v_0 \geq 0$. Для каждого $t \in [0, T]$

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

Если $\int_{\Omega} v_0(x) dx > 0$, то $\int_{\Omega} v(x, t) dx \geq C_* > 0$ для всех $t \in [0, T]$.

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

Теорема

Предположим, что $T \in (0, \infty)$, $u_0 \in L^2(\Omega)$, $u_0 \geq 0$, $\int_{\Omega} u_0 dx > 0$ и $\varphi : \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}_+$ — непрерывная функция, такая что $0 \leq \varphi(\xi) \leq K$.

Тогда существует обобщённое решение $u \in L^\infty(0, T; L^2(\Omega)) \cap L^2(0, T; H_0^1(\Omega))$ задачи, такое что $u \geq 0$, $\partial_t u \in L^2(0, T; H^{-1}(\Omega))$, $u \in C(0, T; L^2(\Omega))$,

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

и $\int_{\Omega} u(x, t) dx > 0$ для всех $t \in [0, T]$, где

$$\zeta(x) = \int_0^T \frac{u(x, t)}{\int_{\Omega} u(x, t) dx} dt.$$

Общая задача с неограниченным потенциалом φ

Регуляризация

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

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

$$u(x, 0) = u_0(x), \quad u(x, t) = 0 \quad \text{при} \quad x \in \partial\Omega,$$

Для каждого $\alpha > 0$ можно получить результат, аналогичный описанному ранее для задачи с весом.

Спасибо за внимание!