В левой трубке по-прежнему находятся одни только молекулы. Однако чтобы осуществить термодинамическое рассмотрение, нужно заменить краны на мембраны с очень своеобразными свойствами (рис. 100): молекулы — тяжелые, но маленькие,— проходят через мембрану слева направо и справа налево. В равновесии концентрация молекул $\nu_1'=\nu_1''$, $\nu_2'=\nu_2''$ слева и справа одинакова. Атомы — легкие, но большие по размерам,— не проходят вовсе через мембрану. Поэтому и можно себе представить, что неограниченно долго справа легкий газ есть, а слева его нет.

Подобные полупроницаемые мембраны очень характерны для термодинамических рассуждений конца XIX века. Замечательные теоретические результаты были получены с помощью мысленных опытов с мембранами.

Но полупроницаемые мембраны существуют в действительности, в жизни. Слова «в жизни» здесь это не просто литературный оборот, роль мембран в живых клетках огромна.

Итак, пусть мембраны Ваших органов чувств впустят в Ваш мозг сладкий раствор познания. С другой стороны, пусть лишняя ученость и схоластика будут извергнуты Вами!

§ 23. Вариационный метод. Скорость диссипации

Вернемся к уравнению Лапласа (§ 16). Его решение при заданном граничном условии в замкнутом виде или даже в виде суммы ряда возможно лишь для областей (Ω) наиболее простого вида (прямоугольный параллелепипед, шар, круговой цилиндр и некоторые другие области). В общем случае особенно большое значение приобретают численные методы, с помощью которых удается построить решение для произвольных областей и произвольных граничных условий.

Один из основных численных методов — вариационный — основан на возможности приближенной минимизации функционала, уравнением Эйлера для которого служит уравнение (1). В § XII.6 ЭПМ было показано, что таким функционалом служит так называемый *интеграл Дирихле*

$$I[\rho]=\int\limits_{(\Omega)}(\operatorname{grad}\rho)^2d\Omega=\int\limits_{(\Omega)}\left[\left(\frac{\partial\rho}{\partial x}\right)^2+\left(\frac{\partial\rho}{\partial y}\right)^2+\left(\frac{\partial\rho}{\partial z}\right)^2\right]d\Omega \qquad (1)$$

(Л. Дирихле — немецкий математик, 1805—1859).

Это дает возможность применить к решению уравнения Лапласа при граничном условии (16.2) метод Ритца, описанный в ЭПМ, § XII.12. Именно, плотность ρ ищется в виде

$$\rho=\rho_0+C_1\rho_1+C_2\rho_2+\ldots+C_n\rho_n, \qquad (2)$$

где ρ_0— какая-либо функция, удовлетворяющая заданному granичному условию, $\rho_1, \rho_2, \ldots, \rho_n$ — какие-либо «базисные» функции, удовлетворяющие соответствующему однородному граничному условию $\rho|_{(S)}=0$, а $C_1, C_2, \ldots, C_n$— постоянные множители, которые подбираются из условия минимизации выражением (2) интеграла (1).

Мы не будем здесь приводить численные примеры на применение метода Ритца для граничного условия (16.2), так как подобные примеры разобраны в § XII.12 ЭПМ; один такой пример приведен в упражнении 1, предлагаемом читателю.

Неожиданный «финт» возникает при решении уравнения Лапласа для граничного условия (16.3). Могло бы показаться, что это решение реализует минимум интеграла (1) среди всех функций, удовлетворяющих условию (16.3). Но это не так! Рассмотрим, например, одномерную задачу о минимизации интеграла

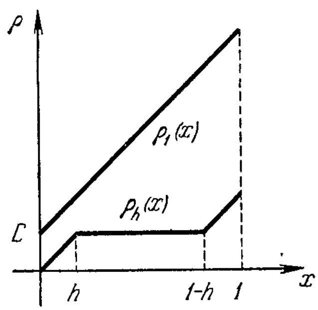

Рис. 101.

$$J=\int_0^1\left(\frac{d\rho}{dx}\right)^2 dx \qquad (3)$$

на множестве всех функций, удовлетворяющих граничным условиям

$$\rho'(0)=1,\ \rho'(1)=1 \qquad (4)$$

(штрихом обозначена производная). Уравнение Эйлера для функционала J, составленное по обычным правилам (ЭПМ, § XII. 4), имеет вид $-2\rho''=0$ и потому, при граничных условиях (4) — решение $\rho_1=x+C$, причем $J[\rho_1]=1$. Однако на функциях $\rho_h(x)$, показанных на рис. 101 и удовлетворяющих условиям (4), будет $J[\rho_h]=2h$. За счет уменьшения h это значение можно сделать как угодно близким к нулю — минимальному значению J на всех вообще функциях; при этом $\rho_h(x)\underset{h\to 0}{\longrightarrow} 0$. Итак, мы видим, что на функциях, удовлетворяющих условиям (4), функционал J минимального значения не достигает; в пределе же мы получаем функцию, которая этим условиям не удовлетворяет.

Чтобы разобраться, в чем тут дело, составим вариацию функционала (3) и проинтегрируем ее по частям:

$$\delta J=\int_0^1 2\frac{d\rho}{dx}\frac{d\delta\rho}{dx}\,dx=2\left(\frac{d\rho}{dx}\delta\rho\right)\Big|_{x=1}-2\left(\frac{d\rho}{dx}\delta\rho\right)_{x=0}-2\int_0^1\frac{d^2\rho}{dx^2}\delta\rho\,dx.$$

Если функция $\rho(x)$ удовлетворяла уравнению $\rho''=0$ и граничным условиям (4), то получаем $\delta J=2\delta\rho|_{x=1}-2\delta\rho|_{x=0}$. Когда мы рассматривали граничные условия 1-го рода, то значения $\delta\rho$ на концах интервала равнялись нулю, откуда и вытекала стационарность значения функционала. Но теперь это условие на $\delta\rho$ не ставится, поэтому функция $\rho_1(x)$ не придает функционалу (3) не только минимального, но даже и стационарного значения!

Рассмотренный пример является типичным. Оказывается, что неоднородное граничное условие 2-го рода для функционала (1) «не выдерживает» перехода к пределу и в пределе заменяется на соответствующее однородное граничное условие, которому отвечает решение $\rho\equiv\mathrm{const}$. Поэтому и применение метода Ритца в рассматриваемой задаче приводит к аппроксимации этого решения, а совсем не того, которое нам нужно.

Однако нетрудно видоизменить постановку вариационной задачи, в результате чего получится решение, удовлетворяющее условиям (4). Именно, рассмотрим функционал

$$I[\rho]=\int_0^1 \rho'^2\,dx+2\rho(0)-2\rho(1) \tag{5}$$

на множестве всех функций (от них не требуется, чтобы они удовлетворяли каким-либо заранее заданным граничным условиям). Такая вариационная задача без граничных условий называется *естественной*. Если на какой-либо функции $\bar\rho(x)$ функционал (5) принимает стационарное значение, то

$$\delta I=\int_0^1 2\bar\rho'\,\delta\rho'\,dx+2\delta\rho(0)-2\delta\rho(1)=0.$$

Интегрируя полученный интеграл по частям, приходим к равенству

$$-2\int_0^1 \bar\rho''\,\delta\rho\,dx+[2-2\bar\rho'(0)]\,\delta\rho(0)+[2\bar\rho'(1)-2]\,\delta\rho(1)=0.$$

Отсюда, учитывая полную произвольность функции $\delta\rho(x)$, в частности, значений $\delta\rho(0)$ и $\delta\rho(1)$, получаем, что $\bar\rho(x)$ удовлетворяет уравнению $\rho''=0$ и граничным условиям (4). Таким образом, хотя в постановке вариационной задачи граничные условия не ставились, но решение этой задачи автоматически удовлетворяет определенным граничным условиям, которые можно вывести из этой постановки (так называемым *естественным граничным условиям*).

Аналогично можно проверить, что для получения решения уравнения Лапласа при граничном условии (16.3) нужно рассмотреть естественную вариационную задачу о придании стационарного значения функционалу

$$\frac{\varkappa}{2}\int_{(\Omega)} (\operatorname{grad}\rho)^2\,d\Omega-\int_{(S)} \psi\rho\,dS$$

на множестве всех функций. Естественные вариационные задачи наиболее удобны при применении метода Ритца в областях сложной формы, так как для таких задач при выборе базисных функций не нужно заботиться о выполнении граничных условий.

Вариационный метод можно применить также для отыскания собственных значений решений, экспоненциальных во времени (§ 14). Остановимся на случае, когда решения строятся в конечной пространственной области (Ω) с граничным условием

$$\rho|_{(S)} = 0, \tag{6}$$

где (S) — граница области (Ω). Чтобы вывести соответствующий вариационный принцип, разложим произвольную функцию $f(x)$, удовлетворяющую этому условию, в ряд по собственным функциям $f_m(x)$, которые нам пока неизвестны:

$$f(x) = \sum_m C_m f_m(x); \tag{7}$$

такое разложение возможно в силу полноты системы собственных функций. Если умножить разложение (7) само на себя, проинтегрировать результат по (Ω) и воспользоваться ортогональностью функций f_m, получим

$$\int_{(\Omega)} f^2 d\Omega = \sum_m C_m^2 \int_{(\Omega)} f_m^2 d\Omega. \tag{8}$$

С другой стороны, из (7) вытекает, что

$$\operatorname{grad} f(x) = \sum_m C_m \operatorname{grad} f_m(x). \tag{9}$$

Для дальнейшего нам потребуется формула

$$\int_{(\Omega)} \operatorname{grad} u \cdot \operatorname{grad} v \, d\Omega = \int_{(S)} u \frac{dv}{dn} dS - \int_{(\Omega)} u \nabla^2 v \, d\Omega, \tag{10}$$

для доказательства которой достаточно применить формулу Остроградского к полю $u \operatorname{grad} v$ (проверьте!). Из формулы (10) вытекает, в частности, что для собственных функций f_i и f_j

$$\int_{(\Omega)} \operatorname{grad} f_i \cdot \operatorname{grad} f_j \, d\Omega = -\int_{(\Omega)} f_i \nabla^2 f_j \, d\Omega = \frac{\lambda_j}{\varkappa} \int_{(\Omega)} f_i f_j \, d\Omega$$

(см. формулу (14.22)). Поэтому, возводя обе части равенства (9) в квадрат и интегрируя, получаем

$$\int_{(\Omega)} (\nabla f)^2 \, d\Omega = \sum_m \lambda_m C_m^2 \int_{(\Omega)} f_m^2 \, d\Omega. \tag{11}$$

Сравним теперь формулы (8) и (11). Если в правой части (11) заменить все собственные значения λ_m на минимальное $\lambda_{\min}$, то правая часть может только уменьшиться, после чего станет равной $\lambda_{\min}\int f^2\,d\Omega$. Таким образом,

$$\lambda_{\min}=\min_f \frac{\int\limits_{(\Omega)}(\nabla f)^2\,d\Omega}{\int\limits_{(\Omega)} f^2\,d\Omega}, \tag{12}$$

причем минимум берется среди всех функций, удовлетворяющих граничному условию (6). Минимум реализует собственная функция, отвечающая $\lambda_{\min}$.

Применение полученного вариационного принципа (12) осуществляется с помощью метода Ритца, описанного выше; при этом в выражении (2) слагаемое ρ_0, конечно, отсутствует. Имеются методы нахождения и дальнейших собственных значений, но чаще всего отыскивают наименьшее, так как именно оно играет важнейшую роль (см. по этому поводу § 14).

Из полученного вариационного принципа вытекает, в частности, монотонная зависимость наименьшего собственного значения $\lambda_{\min}$ от области (Ω), о чем мы уже упоминали в § 14. Допустим, что при граничном условии (6) область $(\Omega)^{(1)}$ имеет наименьшее собственное значение $\lambda_{\min}^{(1)}$, а область $(\Omega)^{(2)}$ — наименьшее собственное значение $\lambda_{\min}^{(2)}$, причем область $(\Omega)^{(1)}$ целиком содержится в $(\Omega)^{(2)}$ и не совпадает с ней. Пусть $f^{(1)}(x)$ — собственная функция, определенная в $(\Omega)^{(1)}$ и отвечающая собственному значению $\lambda_{\min}^{(1)}$. Тогда, в силу сказанного выше,

$$\int\limits_{(\Omega)^{(1)}}(\nabla f^{(1)})^2\,d\Omega \Big/ \int\limits_{(\Omega)^{(1)}} f^{(1)2}\,d\Omega=\lambda_{\min}^{(1)}.$$

Определим функцию $F(x)$ в $(\Omega)^{(2)}$, положив ее равной $f^{(1)}(x)$ на $(\Omega)^{(1)}$ и нулю на остальной части $(\Omega)^{(2)}$; так как $f^{(1)}$ удовлетворяет условию (6), функция F получится непрерывной и потому при ее дифференцировании дельта-слагаемые не появятся. Функция F, очевидно, не является собственной, поэтому в силу принципа (12)

$$\lambda_{\min}^{(2)}<\int\limits_{(\Omega)^{(2)}}(\nabla F)^2\,d\Omega \Big/ \int\limits_{(\Omega)^{(2)}} F^2\,d\Omega.$$

Однако правая часть этого неравенства равна левой части предыдущего равенства (почему?), т. е. $\lambda_{\min}^{(2)}<\lambda_{\min}^{(1)}$, что и требовалось доказать.

Полученное свойство имеет очевидный физический смысл. Оно просто означает, что если область была разогрета, а после этого на границе области поддерживается нулевая температура, то область $(\Omega)^{(1)}$ будет охлаждаться быстрее, чем $(\Omega)^{(2)}$.

Остановимся в заключение на физическом смысле интеграла (1), причем сначала поговорим о случае, когда процесс диффузии рассматривается в неограниченном пространстве.

Выше уже не раз отмечалось основное свойство решений уравнения диффузии (теплопроводности), а именно, сглаживание неоднородности в распределении концентрации или температуры. Одним из проявлений этой тенденции является уменьшение максимального значения и увеличение минимального значения ρ (или, соответственно, температуры). Значит, с течением времени монотонно уменьшается «амплитуда неоднородности» $\rho_{max}-\rho_{min}$.

Однако такая характеристика неоднородности мало удовлетворительна, потому что в ней никак не учитывается поведение ρ в областях между максимумом и минимумом, т. е. распределение ρ во всем пространстве. Естественной мерой неоднородности является интеграл квадрата уклонения концентрации (плотности) от средней, $\frac{1}{2}\int(\rho-\rho_{сред})^2\,d\Omega$ (коэффициент $\frac{1}{2}$ взят для удобства выкладок). Но для задачи о диффузии в безграничной среде с общим конечным количеством вещества, очевидно, $\rho_{сред}=0$. Таким образом, мерой неоднородности в этом случае является просто

$$I_0[\rho]=\frac{1}{2}\int\rho^2\,d\Omega. \tag{13}$$

Ясно, что при уменьшении ρ_{max} и естественном увеличении эффективного занятого объема V величина I_0 должна уменьшаться: в самом деле, $\rho_{max}V=M=\text{const}$, поэтому

$$\frac{1}{2}\int\rho^2\,d\Omega\approx\frac{1}{2}\rho^2_{max}V=\frac{1}{2}M\rho_{max}\to 0 \quad \text{при } \rho_{max}\to 0.$$

Замечательно, что уравнение диффузии позволяет дать количественное выражение закона изменения I_0; при этом доказывается, что I_0 уменьшается монотонно. В самом деле, продифференцируем равенство (13) по t и воспользуемся уравнением диффузии:

$$\frac{dI_0}{dt}=\int\rho\frac{\partial\rho}{\partial t}\,d\Omega=\varkappa\int\rho\nabla^2\rho\,d\Omega.$$

Воспользуемся теперь формулой (10) в «обратном направлении», мы получим

$$\frac{dI_0}{dt}=-\varkappa\int(\nabla\rho)^2\,d\Omega=-\varkappa I[\rho], \tag{14}$$

откуда и вытекает убывание ρ.

Заметим, что такое преобразование возможно и в более сложном случае, когда коэффициент диффузии $\varkappa$ зависит от точки пространства, времени и самóй плотности. В этом случае уравнение диффузии принимает вид

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}=\operatorname{div}(\varkappa \operatorname{grad}\rho),$$

а соотношение (14) заменяется на

$$\frac{dI_0}{dt}=-\int \varkappa (\nabla\rho)^2\,d\Omega.$$

Нам удалось доказать нечто большее, чем простое уменьшение I_0 с течением времени. В самом деле, поскольку $\frac{dI_0}{dt}$ записано в виде интеграла, то можно сказать, **какой вклад** в уменьшение I_0 вносит каждый элемент объема, можно говорить о диссипации (по-русски — рассеянии) неоднородности. Величина $\varkappa(\nabla\rho)^2$ представляет собой объемную скорость диссипации. (Она вполне аналогична «вязкому члену» $\eta(\nabla v)^2$ при рассмотрении диссипации кинетической энергии в жидкости.)

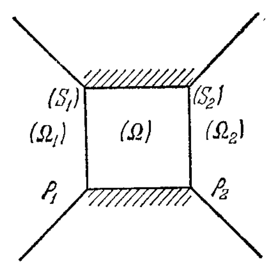

Рис. 102.

Соображения о диссипации можно применить и к диффузии в ограниченном объеме с заданными граничными условиями на стенках. Пусть рассматривается диффузия в области (Ω) (рис. 102), которая примыкает к большим резервуарам (Ω_1) и (Ω_2), где диффундирующее вещество имеет соответственно плотности ρ_1 и ρ_2, причем для определенности $\rho_1>\rho_2$. Пусть стенки, отделяющие (Ω) от этих резервуаров, обладают высокой проницаемостью, поэтому в (Ω) на них выполняются условия

$$\rho|_{(S_1)}=\rho_1,\quad \rho|_{(S_2)}=\rho_2.$$

Остальные же стенки (Ω) пусть непроницаемы, так что на них выполняется условие

$$\left.\frac{d\rho}{dn}\right|_{\text{остальная часть }(S)}=0.$$

Обозначим через $\bar\rho(x)=\rho(x,\infty)$ плотность, которая должна установиться в пределе, при $t\to\infty$. Проводя преобразования, аналогичные примененным для безграничной среды, получим (последите за выкладками, учитывая, что $\nabla^2\bar\rho=0$)

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\frac{1}{2}\int\limits_{(\Omega)}(\rho-\bar\rho)^2\,d\Omega&=\int(\rho-\bar\rho)\frac{\partial\rho}{\partial t}\,d\Omega=\varkappa\int(\rho-\bar\rho)\nabla^2\rho\,d\Omega=\\&=-\varkappa\int\nabla(\rho-\bar\rho)\cdot\nabla\rho\,d\Omega=-\varkappa\int(\nabla\rho)^2\,d\Omega+\varkappa\int\nabla\bar\rho\cdot\nabla\rho\,d\Omega=\\&=-\varkappa\int\limits_{(\Omega)}(\nabla\rho)^2\,d\Omega+\varkappa\int\limits_{(S_1)}\rho\frac{d\bar\rho}{dn}\,dS+\varkappa\int\limits_{(S_2)}\rho\frac{d\bar\rho}{dn}\,dS.\end{aligned}\tag{15}$$

Однако в среднем интеграле $\rho=\rho_1=\text{const}$; вынося ρ_1 за знак интеграла, получаем $\varkappa\int\limits_{(S_1)}\frac{d\bar\rho}{dn}dS$, т. е. устанавливающийся поток $\bar Q$ массы, диффундирующей через (Ω). Аналогично преобразуется последний интеграл в (15) и мы получаем

$$\frac{d}{dt}\frac{1}{2}\int\limits_{(\Omega)}(\rho-\bar\rho)^2\,d\Omega=-\varkappa\int\limits_{(\Omega)}(\nabla\rho)^2\,d\Omega+\bar Q\,(\rho_1-\rho_2). \qquad (16)$$

Однако в какой-либо начальный момент t_0 в качестве ρ можно выбрать произвольную функцию $\rho_0(x)$, удовлетворяющую заданным граничным условиям. Мы видим, что отклонение этой плотности от стационарной убывает тем быстрее, чем больше интеграл (1). В стационарном состоянии, когда левая часть равенства (16) равна нулю, суммарная диссипация $\varkappa\int\limits_{(\Omega)}(\nabla\rho)^2\,d\Omega$ принимает минимально возможное значение $\bar Q(\rho_1-\rho_2)$, тогда как для любого другого состояния, как мы знаем, значение суммарной диссипации больше этого минимального. Принцип минимума интеграла Дирихле (1) физически равносилен принципу минимума диссипации: среди всех состояний, совместимых с заданными граничными условиями, в среде устанавливается такое состояние, при котором суммарная диссипация принимает минимально возможное значение.

Для стационарного состояния равенство (16) дает выражение для потока $\bar Q=\frac{\varkappa}{\rho_1-\rho_2}\int\limits_{(\Omega)}(\nabla\rho)^2\,d\Omega$. Оказывается, что эта формула остается справедливой и для случая, когда среда, в которой происходит диффузия, стационарно движется в (Ω) — например, этой средой служит жидкость и она перемешивается. Из физических соображений ясно, что такое перемешивание увеличивает поток $\bar Q$, а потому и средний по (Ω) квадрат градиента ρ, т. е. и суммарную диссипацию. Таким образом, при малых скоростях перемешивания мы находимся вблизи минимального значения $\bar Q$, и потому приращение $\bar Q$ имеет второй порядок малости.

Упражнения

1. Примените метод Ритца к решению уравнения (1) в квадрате $0\leqslant x, y\leqslant l$ при граничных условиях $\rho|_{x=0}=\rho|_{y=0}=\rho|_{y=l}=0$, $\rho|_{x=l}=\sigma_0\sin\frac{\pi}{l}y$, выбрав в качестве ρ_0 (см. (2)) функцию, линейную по x, а в качестве единственной базисной функции $\sin\frac{\pi}{l}x\cdot\sin\frac{\pi}{l}y$; то же — для базисной функции $x(l-x)\,y\,(l-y)$; сравните значения найденных решений в центре квадрата.

2. Докажите, что при граничном условии $\left.\frac{d\rho}{dn}\right|_{(S)}=0$ интеграл $I[\rho]$ монотонно убывает во времени.