第22卷　第6期　重庆建筑大学学报　Vol 22 No. 6
2000年12月　Journal of Chongqing Jianzhu University　Dec 2000

文章编号: 1006- 7329(2000)06- 0078- 06

关于力学变分原理及应用的几点注记*

徐硕昌
(中国科学院力学研究所, 北京 100080)

摘要: 从论述经典力学中的Hamiltonian原理的推广开始, 概述泛函分析中算子理论和非平衡热力学变分原理基于场的变分的新发展。余一对偶变分原理集伴随变分法和广义格林函数法于一体, 它既是有限元法、又是边界元法最普遍的数学基础; 从物理观点看, 唯象的非平衡热力学变分原理函盖所有宏观物理体系, 适用于所有连续力学系统, 但作为具体描述方法还有一定局限, 有待进一步发展。

关 键 词: 有限元法; 边界元法; 余- 对偶变分原理; 局部动力势
中图分类号: O177; O551　　**文献标识码**: A

1　Hamiltonian原理及对流体力学的推广

经典力学中的Hamiltonian原理是描述有限个自由度离散力学系统运动的。在19世纪末和20世纪初成功地推广应用于电磁场和量子力学的变分描述[1]。20世纪下半叶, 变分方法在弹塑性理论中得到极大发展[2~5]。对于流体力学的应用, 相对发展较慢而且受到一定局限。

Serrin (1959)对于早期经典流体力学中变分方法的研究进展作了概述[6]。Flinlayson (1987)对于20世纪中流体力学和传热中的变分原理研究作了概述([5]P334~355)。在这篇综述文章中, 按照"定常、不可压缩、理想流体", "定常、可压缩、理想流体", "非定常、可压缩、理想流体"和"定常、不可压缩、粘性流体"几方面进行总结, 最普遍结论转引如下:

1.1　定常、不可压缩、粘性流体的变分原理

定常、不可压缩、粘性流体由Navier- Stokes方程控制:

$$\rho u_j u_{i,j} = - p_{,i} + u u_{i,jj} \tag{1}$$

$$u_{i,i} = 0 \tag{2}$$

这些方程被称为u- p列式法, 因为它们是以基本变量速度和压力来描述的, 依据变分原理中的泛函极值条件导出Euler- Lagrange方程是直接的而无需附加条件。但逆问题成立是有条件的。对于这样的变分逆问题: 是否存在着一个Lagrange算子, 由它能导出(1)和(2)作为Euler- Lagrange方程?Milliken[7]的回答是: 倘若Lagrange算子是速度及其导数的多项式, 则不存在这样的算子。Finlayson[8]用Fréchet微分证明任何形式的Lagrange算子都是如此, 只有$\vec{u}\times(\nabla\times\vec{u}) = 0$或$\vec{u}\cdot\nabla\vec{u} = 0$的情形下, u- p列式法的方程组(1)和(2)才存在变分原理。Barteman[9], Finlayson[8]以及Usher和Craik[10]曾经证明了Navier- Stokes方程和其伴随方程组所满足的伴随变分原理成立。

在20世纪中所取得研究进展绝大部分局限于定常、不可压缩、粘性流体的范围, 对于可压缩、粘性流体只有一些特殊的、个别情形被解决。以下我们试图解释为什么会如此。

1.2　无穷多个分子(球形、弹性碰撞)组成的宏观力学系统

统计物理中, 应用这样一个模型来描述力学系统宏观运动的不可逆过程[11]。设系统宏观广义

* 收稿日期: 2000- 05- 01
基金项目: 国家自然科学基金重点项目(19789201)
作者简介: 徐硕昌(1939-), 男, 江西临川市人, 研究员, 中国科技大学研究生院教授, 主要从事应用数学和流体力学研究。

坐标$Q_1, Q_2, \cdots, Q_s, \cdots\cdots$, 一般系统内部分子运动不仅依赖于物体在给定时刻的运动, 而且还依赖于这个运动以往的历史, 所以运动方程中不仅会出现广义坐标Q_s和它们的时间的一阶、二阶微高而且还将出现更高阶微高。在这种情形下, 系统的宏观Lagrange函数当然不存在; 因而不同情形运动方程将具有完全不同的性质。

当处理系统在某种平衡位置附近的运动时, 可以认为系统的运动由广义坐标Q_i和广义速度$\mathring{Q}_i$所完全决定, 在平衡位置所有$Q_i = 0$, 系统的动能$K(\mathring{Q}_i)$是广义速度$\mathring{Q}_i$的二次函数, 而不依赖广义坐标Q_i, 外力作用引起势能$U(Q_i)$是广义坐标的二次函数, 耗散力通过耗散函数

$$f = \frac{1}{2}\Gamma_{i,k}\mathring{Q}_i\mathring{Q}_k \qquad (\Gamma_{i,k} = \Gamma_{k,j}) \tag{3}$$

给出为$-\partial f/\partial\mathring{Q}$。

引入Lagrange函数$L = K - U$, 得到运动方程具有形式

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial\mathring{Q}_i} - \frac{\partial L}{\partial Q_i} = -\frac{\partial f}{\partial\mathring{Q}_i} \qquad (i = 1, 2, 3, \cdots) \tag{4}$$

在这个模型中没有考虑分子形状与非弹性碰撞的影响。

1.3　连续系统的无穷可分性和可和性

在上述模型中将广义坐标数$n\to\infty$的极限是否就可认为得到连续系统的运动描述?回答是在无耗散存在时可以严格证明是成立的。将连续系统离散化分为n个微元, 假设描述所有微元运动流型的广义坐标已经被选为是主坐标$n\to\infty$后, 它们构成连续系统运动位型空间的完备系, 任意的连续系统的运动位型可由所有主坐标线性组合来构成。把连续系统离散化再取极限得到连续系统。极限过程成立的性质, 我们称之为无穷可分性。

对于耗散的连续系统上述结论就不再能证明, 一般耗散系统的主坐标系不具完备性, 这就是说, $n\to\infty$的极限和耗散系统不一定等价。

要想把Hamiltonian原理直接推广到连续系统, 就必须先将连续系统离散化、再取极限。假设耗散连续系统离散化为n个有限元, 假设第i个有限元可用广义坐标Q_i描述其运动, 如果阻尼力$-\frac{\partial f}{\partial\mathring{Q}_i}$是作用在第$i$个有限元的质心上, 则其运动由方程(4)描述。将$n\to\infty$得到的无穷个Lagrange方程的系统和Navier-Stokes方程(1)和(2)描述的耗散连续系统等价吗?不等价, 因为粘性耗散力以剪切力形式作用于相邻两有限元之间, 是面力, 不能以体力$-\frac{\partial f}{\partial\mathring{Q}_i}$来替代。

对于理想连续系统既满足无穷长分性、也满足可和性。第i个有限元的Lagrange函数$L_i = K_i - U_i$, 整个系统的Lagrange函L等于n个有限元Lagrande函数L_i之和, 即

$$L = \sum_{i=1}^{n}L_i = \sum_{i=1}^{n}(K_i - Q_i)$$

相应的Euler-Lagrange方程为

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial L}{\partial\mathring{Q}_i}\right) - \frac{\partial L}{\partial Q_i} = 0 \qquad (i = 1, 2, \cdots, n) \tag{5}$$

当$n\to\infty$(5)描述的Hamiltonian系统和Euler方程描述的理想不可压流体系统是完全等价的。

直接推广Hamiltonian原理的二个条件: 无穷可分性和可和性决定适用范围为线性保守系统。直接通过场的变分表述可以回避这两个条件限制。对于不可压缩粘性流体, 温度场和速度场可分别求解, 能量方程和运动方程不耦合, 运动能量被粘滞耗散作用变成热能, 不考虑温度场再反过来对流体运动的影响, 可压粘性流体运动的速度场和温度场要同时耦合求解。泛函分析算子理论中的余一对偶变分原理[12]和非平衡热力学中耗散结构的变分原理[13]正是从整体场的变分取得的成功。从数学观点看, 将自伴线性算子推广到非自伴, 算子方程和对应伴随算子方程要同时求解, 再应用广义格林定理将算子方程耦合对偶算子方程求解, 最新最完整的结果是余一对偶变分原理; 它集伴随变分法和广义格林函数法于一体, 既是有限元的数学基础, 也是边界元的数学基础[12]; 从物理观点

看,唯象的非平衡热力学函盖所有宏观物理体系,适用于所有连续力学系统,耗散结构的变分原理具有普遍适用性[13]。

2 余-对偶变分原理和耗散结构变分原理

2.1 余-对偶变分原理[12]

假设线性算子 T 是映 Hilbert 空间 H 入另一 Hilbert 空间 G 的连续映象,E 是映 G 到其对偶空间 G 的正则同构映像,T^* 为的伴随算子,既满足

$$\langle \sigma, T.u\rangle_v = \langle T^*\sigma, u\rangle_u \quad (\sigma \in V') \tag{6}$$

假设 Ω 为 R^n 中有界开集,$\partial\Omega$ 为 $\overline{\Omega}$ 的光滑周界。

$$\partial\Omega_1 \cup \partial\Omega_2 = \partial\Omega; \quad \partial\Omega_1 \cap \partial\Omega_2 = \Phi \tag{7}$$

考虑如下一般的抽象线性边值问题:

$$\begin{aligned} &Tu = v, \text{在 } \Omega \text{ 内}: Bu = g, \text{在 } \partial\Omega_1 \text{ 上};\\ &Ev = \sigma, \text{在 } \Omega \text{ 内};\\ &T^*\sigma = f, \text{在 } \Omega \text{ 内}: B^*\sigma = h, \text{在 } \partial\Omega_2 \text{ 上}\end{aligned} \tag{8}$$

应用变分方法求解上述抽象算子问题(2-3)可以证明如下余一对偶变分原理:任意满足抽象算子问题(8)的解组 $w = (u, v, \sigma) \in H \times G \times G$ 是如下二次泛函的极值点:

$$L_0(u, v, \sigma) = \frac{1}{2}\langle Ev, v\rangle_G + \langle \sigma, Tu - v\rangle_G - \langle f, u\rangle_H + \langle \delta_0\sigma, Bu - g_0\rangle_{\partial G} - \langle h_0, \gamma_0 u\rangle_{\partial H} \tag{9}$$

在上式(9)中,$\langle\cdot,\cdot\rangle_G$, $\langle\cdot,\cdot\rangle_H$, $\langle\cdot,\cdot\rangle_{\partial G}$, $\langle\cdot,\cdot\rangle_{\partial H}$ 表示在空间 $G'\times H$, $H'\times H$, $\partial G'\times\partial G$ 和 $\partial H'\times\partial H$ 上对偶配对(duality pairing)。由于在 Ω 内,$Ev = \sigma$ 成立,自然在 $\partial\Omega$ 上成立

$$\delta_0 Ev = \delta_0\sigma \tag{10}$$

另外,

$$g_0 = \begin{cases} g, & \text{在 } \partial\Omega_1 \text{ 上}(g \text{ 在 } \partial G \text{ 上给定})\\ g_0(u) \equiv Bu & \text{在 } \partial\Omega_2 \text{ 上}\end{cases} \tag{11}$$

$$h_0 = \begin{cases} h(\sigma) \equiv B^*\sigma, & \text{在 } \partial\Omega_1 \text{ 上}\\ h, & \text{在 } \partial\Omega_2 \text{ 上}(h \text{ 为 } \partial H' \text{ 上给定})\end{cases} \tag{12}$$

在[12]中,给出上述普遍的余一对偶变分原理的证明,同时给出这个原理的七种特殊情形下的表述。作为此原理的应用实例,给出了在弹性理论中14种情形下的具体应用。进一步概述了对于这种原理在塑性理论、流体力学、磁流体力学和热传导问题中的广泛应用。

2.2 耗散结构的变分原理[13,14]

耗散结构和自组织理论是 Prigogine 为首的布鲁塞尔学派创立的远离平衡态的开放系统的非平衡热力学理论的新体系,由于这一卓越贡献而荣获1977年度诺贝尔化学奖。

1969年 Prigogine 在“理论物理学和生物学”国际会议上正式提出耗散结构理论。对于一个远离平衡的开放系统(不管是力学的、物理的、化学的、生物的乃至社会的、经济的系统),通过不断地与外界交换物质和能量,在系统内部某个参量变化达到一定的临界值时,通过涨落,系统可能发生突变,即非平衡相变,由原来的混乱无序状态转变为一种在时间上、空间上或功能上有序状态。这种在远离平衡的非线性区形成的新的稳定的宏观有序结构,由于需要不断与外界交换物质或能量才能维持,因而称之为“耗散结构”。

经典力学中的变分原理在非平衡热力学中得到极大地发展,这些变分原理包括最小熵产生原理;超量熵产生最小定理和局部动力势变分原理。

1) 最小熵产生定理

依据质量、能量守恒关系计算出熵产生率:

$$P = \frac{d_i S}{dt} = \sum_\rho J_\rho X_\rho \tag{13}$$

其中 J_ρ 是各种不可逆过程(如化学反应、热流和扩散) 有关速率, X_ρ 为与此对应的广义力(如化学亲合力、温度梯度、化学势梯度)。

在线性非平衡热力学中, 证明了最小熵产生定理: 对于充分接近平衡区的定态, 熵产生达到最小, 在同一边界条件下, 与此参考态相邻近的态, 具有较高的熵产生。最小熵产生定理意味着存在一个变分原理。熵产生率的时间变化率 $\frac{dp}{dt}$ 是一个热力学宏观参数的泛函。

在定态满足

$$\delta\frac{dp}{dt} = 0 \tag{14}$$

稳定的定态 $\delta^2\frac{dp}{dt} > 0$; 不稳定的定态 $\delta^2\frac{dp}{dt} < 0$。这是保守力学系统最小势能原理在线性非平衡热力学中的推广。在远离平衡态区域, 最小熵产生定理不再成立; 而成立超量熵产生最小定理。

2) 超量熵产生最小定理

在远离平衡态区域, 熵的时间变化率包括两部分, 即

$$\frac{dp}{dt} = \sum X_\rho\left(\frac{dJ_\rho}{dt}\right) + \sum J_\rho\left(\frac{dX_\rho}{dt}\right) = \frac{d_J p}{dt} + \frac{d_X p}{dt} \tag{15}$$

而线性区域成立

$$\frac{d_X p}{dt} \leq 0 \tag{16}$$

对于普遍情形下, 保证定态稳定的条件是

$$\sum_\rho \delta J_\rho \delta X_\rho \geq 0 \tag{17}$$

这里 δJ_ρ 和 δX_ρ 是来源于状态偏离参考态时超量流和超量力。

把熵看作非平衡定态的一个函数, S_0 为参考态的熵值。S 在 S_0 邻近可展开为

$$S = S_0 + \delta S + \frac{1}{2}\delta^2 S \tag{18}$$

在力学平衡范围内能证明

$$\frac{1}{2}\frac{d}{dt}\delta^2 S = \sum_\rho \delta J_\rho \delta X_\rho \tag{19}$$

在非线性非平衡态热力学理论中证明了超量熵产生最小定理: 在平衡态

$$\frac{1}{2}\frac{d}{dt}\delta^2 S = 0 \tag{20}$$

由(17) 和(19) 得到 $\frac{1}{2}\frac{d}{dt}\delta^2 S \geq 0$ 对应参考态稳定的条件。

3) 局部动力势与变分原理

在偏微分方程理论中, 将其化为等价的变分方程和积分方程求解, 可以降低对解的光滑性要求, 这也是求广义解的基本出发点。经典变分法中, 在一次连续可微函数集中求出二阶的 Euler 方程的解, 放宽了可取函数范围。在非平衡热力学中, 将可取函数范围放宽到最大范围——热力学的涨量参量, 实质上是应用 Galer R in 方法来推广 H am ilton ian 原理。

从系统的质量、动量和能量变化方程出发:

$$\frac{\partial \rho_\gamma}{\partial t} = [\Xi_\gamma]; \quad \rho\frac{\partial v_i}{\partial t} = [\Theta_i]; \quad \frac{\partial(\rho_e)}{\partial t} = [Y] \tag{21}$$

用 $\delta(\Xi_\gamma T^{-1})$, $T^{-1}\delta v$, δT^{-1} 分别对上述三个方程取内积运算相加得到:

$$\int\left\{\left(\frac{\partial \rho_\gamma}{\partial t} - [\Xi_\gamma]\right)_0 \delta(\mu_r T^{-1}) + \left(\rho\frac{\partial v_i}{\partial t} - [\Theta_i]\right)_0 T^{-1}\delta v_i + \left(\frac{\partial(\rho_e)}{\partial t} - [Y]\right)_0 \delta T^{-1}\right\} d\tau = 0 \tag{22}$$

其中下标0为参考态(依赖时间 t 和 x_i), 对(22)进行分部积分并利用在边界上诸量变分为零的条件导出局部动力势

$$L\ (T, T_0, \mu_\gamma, \mu_{\gamma 0}, v_i, v_{i0}) \tag{23}$$

由此得到

$$\Psi = \int (T, T_0; \mu_\gamma, \mu_{\gamma 0}; v_i, v_{i0})\, d\tau \tag{24}$$

这是 Hamilton 函数在非平衡热力学中具体推广形式。

由泛函 Ψ 的极值条件

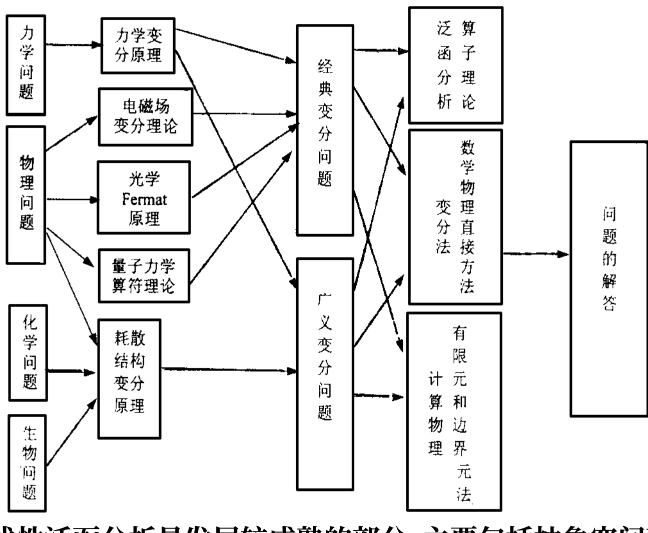
$$\delta\Psi = 0 \tag{25}$$

得到的 Euler 方程正是三类守恒方程(21)。

从物理观点讲, 非平衡热力学体系是一个无所不包的宏观体系。变分方程(25) $\delta\Psi= 0$也是一个普遍原理, 但在[13]中是在固定边界条件下进行证明的。类似经典变分法中自由边界变分问题, 这一变分原理有待推广。

3 各种变分原理在力学和物理问题中的应用

现代数学和数学物理相结合形成二大研究方向: 其一为数学物理中的微分几何方法; 其二为数学物理中的泛函分析方法。现代数学物理方法即是基于泛函空间、拓朴流型和群论等现代数学方法应用于求解数学物理问题的新发展。应用现代变分理论求解力学和物理问题的步骤可用下表描述。



在泛函分析中线性泛函分析是发展较成熟的部分, 主要包括抽象空间理论, 线性算子理论和广义函数理论; 相对而言, 非线性泛函分析正处于蓬勃发展阶段, 它为数学物理问题中非线性方程的定性分析和求解, 为研究无穷维空间的微积分, 变分问题, 分叉、混沌和突变理论提供强有力的工具[15, 16]。

4 结 论

通过连续系统离散化取极限过程将 Hamiltonian 原理直接推广到保守无耗散系统是可以严格证明的。这个过程成立要满足无穷可分性和可和性两个条件. 对于不可压粘性流体, 粘性力归入外力做功项。这个问题简单在于速度场和温度场可分别求解, 动能耗散完全变为热能。

泛函分析中新发展的余一对偶变分原理集伴随变分法和广义格林函数法于一体, 既是有限元,

也是边界元的普遍数学基础。不过只限于线性情形下成立。在具体边界条件下求基本解是每个新问题要首先解决的问题。

原则上讲, 耗散结构变分理论适用于所有宏观力学和物理系统, 应用时一般有固定边界条件和无限范围系统条件的局限, 如何将位势理论普遍推广到局部动力势也有待进一步研究。

广义函数是格林函数的普遍数学理论, 将变分法和广义函数相结合应用于边界有限元方法具有广阔应用前景, 值得深入研究。

参考文献:

[1] 戈德斯坦H. 经典力学 [M]. 北京: 科学出版社, 1981, 第11章
[2] 胡海昌. 弹性力学变分原理及其应用 [M]. 北京: 科学出版社, 1981
[3] 鹫津久一郎. 弹性和塑性力学中的变分法 [M]. 北京: 科学出版社, 1984
[4] 钱伟长. 广义变分原理 [M]. 上海: 知识出版社, 1985
[5] 卡德斯图赛H. 主编. 有限元手册 [S]. 北京: 科学出版社, 1996
[6] Serrin J. Mathematical Principle in Classical Fluid Mechanics [J]. In: Flugge S ed. Handbuch der Physies, Vol 8, Pt. 1, Berlin: Springer-Verlag, 1959, 125～263
[7] Milliken CB. Phys Mag., 1929, 7(7): 641～662
[8] Finlayson BA. Phys Fluids, 1972, 15: 963～967
[9] Dryden HL. Murnaghan FP and Bateman H. Hydrodynamics [M]. 7th ed. New York: Dover, 1956
[10] Usher JR and Craik DN. J. Fluid Mech, 1974, 66: 209～221
[11] 朗道LD, 栗弗席兹EM. 统计物理学 [M]. 北京: 人民教育出版社, 1964, 475～479
[12] Oden JT and Reddy JN. Variational Methods in Theoretical Mechanics [M]. Berlin: Spring-Verlag, 1983
[13] Glansdooff P and Prigogine I. Thermodynamic Theory of Structure, Stability and Fluctuations [M]. London: Wileg-Interscience, 1971
[14] 尼科利斯G, 普里戈京I. 非平衡系统的自组织 [M]. 北京: 科学出版社, 1986
[15] Berge M S. 非线性和泛函分析 [M]. 北京: 科学出版社, 1986
[16] Oden JT. Qualitation Methods in Nonliear Mechanics [M]. New York: Prentice-Hall, Inc. 1986

Some Notes on the Variational Principles of Mechanics and Their Applications

XU Shou-chang
(Institute of Mechanics, Academia Sinica, Beijing 100080, China)

Abstract: This paper discusses the limitations of extension of classical Hamiltonian Principle to continuous systems, then reviews the new developments of operational theory in functional analysis and variational principles in non-equilibrium thermodynamics based on field variation. Complementary-dual variational principles including adjoined variational methods and generalized Green function method are bases of finite element analysis and boundary element analysis as well. From the point of view of physics, variational principles of macroscopic non-equilibrium thermodynamic can be applied to all continuous mechanical systems. However, they have some limitations in application scope and remain to be developed.

Keywords: finite element method; boundary element method; complementary-dual variational principles; local kinematical potential