arXiv:2611.33049v1 [physics.flu-dyn] 24 Nov 2026

单极性注入驱动电对流中的非线性非模态稳定性与最小扰动

Pedro A. Vázquez [1 a)], [2], 和 A. T. Pérez[1])应用物理系 *III*，*ETSI*，塞维利亚大学，*Camino de los Descubrimientos s/n*，*41092* 塞维利亚，西班牙[2])电子与电磁学系，物理学院，塞维利亚大学，*Avda. Reina Mercedes s/n*，*41012* 塞维利亚，西班牙

介电液体受到单极性电荷注入时会发生亚临界电对流。即使远低于线性稳定性理论阈值，对流仍可维持；实验报告的起始阈值也远低于该阈值。我们采用非线性非模态优化，确定在线性阈值以下触发对流所需的最小电荷扰动。该方法基于完整电流体动力学方程的直接–伴随公式，在振幅趋于零的极限下可恢复经典线性阈值。在有限振幅下，最危险的扰动是局部电荷亏损，而非电荷过剩，因为在库仑斥力作用下，亏损消散得更慢。转变所需的最小扰动从线性阈值附近约为注入电荷的 0.5%，增至阈值的三分之二处的 3%；此处对流分支终止，这一结果与直接数值模拟一致。在临界振幅附近，轨迹趋近于一个不稳定稳态，即边缘态；它分隔静止状态与对流状态的吸引域，并源自临界线性模态。最优扰动增长过程中涉及的阻尼振荡模态是离子漂移的渡越时间模态。对流模态是其中的第一个模态，它因与流动耦合而变为稳态，这解释了不稳定性为何以稳态运动的形式起始。因此，微小的电荷涨落可使电对流起始阈值降至线性阈值的约三分之二，有助于解释线性理论与实验结果之间的差异。

I. 引言

电流体动力学（EHD）流动源于电场与介电流体中的电荷相互作用[1]。单极性电荷注入驱动的电对流是一种电流体动力学不稳定性，其中空间电荷产生的库仑力会使原本静止的介电液体失稳。研究最广泛的构型之一，是由两个平行电极夹持的水平介电液层，

在该液层两端施加较强电场，并从其中一个电极注入单极性电荷。电场作用于注入的空间电荷，产生体力，进而驱动流体运动，并形成称为电对流滚胞的涡旋结构。

尽管这种流动在几何和物理特性上与热瑞利–贝纳德对流十分相似，但其电荷输运机制导致了本质不同的分岔动力学。流动的稳定性由一个无量纲参数——电瑞利数 $T = \varepsilon V_0/(\mu K)$——控制，该参数表示电力与黏性力之比，其中 ε为流体的介电常数， V_0 为外加电压， μ 为动力黏度， K 为离子迁移率。该参数的临界值记作 T_c，标志着电对流运动的起始。

早期实验已经报道了介电液体中由电驱动的涡旋运动，相关观测至少可以追溯到 Avsec 和 Luntz[2]。由

a)电子邮箱：pvazquez@us.es

Watson、Schneider 和 Till[3] 开展的测量证实了绝缘液体在空间电荷限制条件下电对流运动的起始以及电流增强。随后，Lacroix、Atten 和 Hopfinger[4] 开展的实验描述了对流胞速度场，并验证了亚临界滞后回线；对流在接近 $T \approx 100$时开始出现，远低于线性预测值。Malraison 和 Atten[5] 进行的电流涨落测量进一步表明，在中等至较大纵横比的胞室中，流动会从静止状态直接转变为时变混沌运动，并且随着电压升高，流动状态会从中等电压下的黏性主导区转变为高电压下的惯性主导区。之后，Pontiga、Castellanos 和 Malraison[6] 开展的瞬态实验通过跟踪阶跃电压响应和表观离子迁移率，将这一经验基础扩展到了掺盐非极性液体中的非自治场依赖电荷注入。

平行板电极间单极性电荷注入的线性稳定性分析由 Schneider 和 Watson [7] 以及 Atten 和 Moreau[8], 建立，他们提出了控制方程。在空间电荷限制（SCL）自治注入条件下，经典模态稳定性理论预测，静水静止态在临界阈值 $T_c \approx 161$ （或 160.75）[7], 处会对无穷小扰动失稳；而在弱注入区，中性稳定判据按 $T_c C^2 \approx 220.75$ 缩放。这里，$C = q_i H^2/(\varepsilon V_0)$ 是注入水平参数，其中 q_i 是注入器处的电荷密度， H 是电极间距。Pontiga、Castellanos 和 Malraison[6] 将这一线性框架扩展到非自治场依赖电荷注入（由肖特基效应控制），并证明，尽管场依赖边界条件会显著改变中等注入水平下的中性稳定性，但强注入极限下的阈值仍为 $T_c \approx 161$。虽然经典模型因电荷扩散相较于离子漂移的量级很小而忽略了电荷扩散，但后续 Pérez 和 Castellanos[9] 以及 Zhang 等人[10] 的分析表明，纳入实际的电荷扩散会使电荷密度梯度平滑，并将理论线性阈值降低至 $T_c \approx 140$。

非模态稳定性理论通过关注扰动的有限时间放大，而非其渐近指数增长，为经典特征值方法提供了替代方案。在线性系统中，当线性化演化算子为非正规时，这种方法尤其重要，因为衰减特征模态的叠加可能经历显著的瞬态放大[11,12]。相应的最优扰动被定义为：在给定范数约束下，使指定目标时刻的扰动某一选定度量最大化的初始扰动。在流体力学中，线性最优扰动和瞬态增长已成为识别受底层流动动力学最有效放大的扰动结构的标准工具。

通过在控制方程中保留非线性项，同一优化概念可以扩展到有限振幅扰动。在这种情况下，最优扰动通过最大化有限时间目标泛函获得，同时受完整的非线性演化方程和给定初始扰动振幅的约束。所得的约束优化问题通常通过直接—伴随循环过程求解。首先将初始扰动向前推进，随后从目标时刻向后积分相应的伴随方程，并沿目标泛函梯度的方向迭代更新初始条件。Pringle 和 Kerswell [13] 以及 Cherubini 等人[14], 在向湍流转捩的背景下发展了这一瞬态增长分析的非线性扩展，随后该方法被用于识别转捩过程中的有限振幅最优扰动和最小种子[15,16]。近年来，这一框架又扩展到其他形式的有限振幅优化，包括稀疏非线性最优扰动[17]。

尽管非线性非模态优化已广泛应用于流体动力学转变问题，但其在电流体动力学不稳定性中的应用仍相对鲜有探索。Zhang 等[10]，对该问题进行了线性瞬态增长分析，首次揭示了非模态效应可能在单极性注入电对流中发挥的作用。对于无横流的构型，他们发现瞬态放大虽有限但相对较小，不足以解释线性稳定性阈值与实验观测到的较低有限振幅起始之间的差异

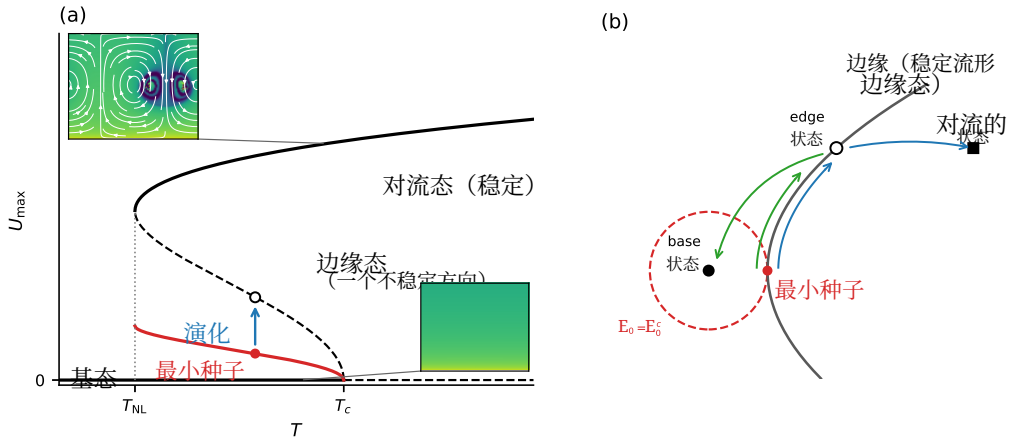

图 1. 次临界转变示意图。(a) 以最大速度 $U_{\max}$表示的分岔图，其中稳定分支（实线）和边缘态（虚线）如图所示。红色曲线仅作示意，并非一种状态，它表示最小种子位于边缘态的稳定流形上。插图：对流态中 $q_b + q'$（对数色标，同图 10）处的总电荷，以及静水态中的总电荷；前者带有流线，且接近 $T = 112.23$，而静水态中没有涡卷。(b) 固定 $T_{\mathrm{NL}} < T < T_c$时的相空间。边缘态（灰色）将基态和对流态的吸引域分隔开，球面 $E_0 = E_0^c$（红色虚线）在最小种子处与其相切。蓝色和绿色：分别略高于和略低于 E_0^c的扰动。曲线仅为定性示意。

。这表明，导致亚临界电对流的关键机制无法通过无穷小的线性化描述来捕捉。Feng 等 [18], 探讨了另一种解释，认为这种差异源于实验中用作注入器的离子交换膜存在不均匀性。他们通过对电荷密度和电势施加随机边界条件来建立模型，发现由于流动具有亚临界性质，随着涨落振幅增大，对流起始阈值会降低并趋近于实验值。本研究采用优化方法，量化了能够在低于线性阈值时触发对流的最小电荷扰动。

图 1 总结了指导本研究的整体图景。单极注入问题是亚临界的。在非线性阈值 T_{NL} 与 T_c 之间，稳定的静水态与稳定的对流态 [图 1(a)] 共存。二者由一条不稳定的边缘态分支（虚线）分隔；该分支在 T_c 处从静水态分岔，并在 T_{NL} 处通过鞍结分岔与稳定的对流分支相交。在相空间中 [图 1(b)], , 这条不稳定分支上的状态 [19,20] 具有一个不稳定方向，该方向最终导向静止或对流。其稳定流形，即边缘，将两个稳定状态的吸引域分隔开来。最小种子是距静水态最近的边缘上的点，也就是能够触发转变的最小振幅扰动 [15,16], ; 球面 $E_0 = E_0^c$（虚线圆）在此处与边缘相切。其振幅 $E_0^c(T)$ 衡量静水态的鲁棒性。在图 1(a) 中，分支用最大速度 $U_{\max}$ 表示，该量可以明确识别这些分支。静水态具有 $U_{\max} = 0$。插图显示了静水态和对流态中的电荷分布：前者呈分层结构且没有涡卷，后者包含两个反向旋转涡卷。红色曲线仅用于示意。它不是一个状态，因为最小种子是初始速度为零的电荷扰动。该曲线表示，对于 T 介于 T_{NL} 和 T_c 之间的每个值，最小种子都位于边缘态的稳定流形上。更小的扰动会直接衰减。略高于（蓝色）和略低于（绿色） E_0^c 的扰动沿边缘演化至边缘态附近，随后沿其不稳定流形离开，分别趋向对流或回到静止状态。最小种子本身将收敛到边缘态。曲线为定性示意，图 11 展示了计算得到的图示。

非线性优化问题使用 Firedrake 进行离散化[21], ，这是一种有限元库。相应的离散伴随方程和梯度由 Python 库 Pyadjoint 自动生成[22], ，该库是 dolfin-adjoint 库的后继[23]。它利用正问题的高层变分表示，直接根据有限元公式构造离散切线模型和伴随模型，从而无需手动推导和实现离散伴随系统。

本文结构安排如下。第II 节介绍周期层中单极性注入电对流的控制方程、静水基态以及经典线性模态问题，其离散阈值将作为全文其余部分的参照。第III 节构建非线性非模态优化问题，并说明其离散化以及直接–伴随优化过程。第IV 节评估该方法的空间和时间收敛性，确定优化行为呈线性的振幅上限，并展示非模态框架能够恢复线性失稳阈值。第V 节给出主要结果：线性阈值以下的有限振幅最优扰动及其结构、偏向电荷亏缺扰动的非线性机制、转变至对流态的最小种子、边缘态以及对流分支的终点 T_{NL}，并将这些结果与直接数值模拟进行比较，同时将最优轨迹分解到直接与伴随时间特征模态上。第VF节讨论这些结果对电对流起始的意义。第VI 节指出，通过这种分解揭示的受阻尼振荡模态是离子漂移的渡越时间模态，表明对流模态是其中第一个被流动变为定常的模态，并证实这些模态均不会变得不稳定。第VII节总结全文。伴随方程的推导见附录A；直接问题的整体弱形式见附录B；水平一致的渡越时间模态的精确解见附录C。

II. 控制方程与线性稳定性参照

A. 有量纲方程

我们考虑一层厚度为 H 的水平介电液体，该液体被限制在两个平行电极之间，层两端施加有强电场，并且下电极注入单极性电荷。流体运动、电荷输运和电场的控制方程为不可压缩纳维–斯托克斯方程，并与电荷守恒方程和泊松方程耦合：

$$\rho\left(\frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial t}+\boldsymbol{u}\cdot\nabla\boldsymbol{u}\right)=-\nabla p+\mu\nabla^2\boldsymbol{u}+q\boldsymbol{E}, \tag{1}$$

$$\nabla\cdot\boldsymbol{u}=0, \tag{2}$$

$$\frac{\partial q}{\partial t}+\nabla\cdot\left[q\left(\boldsymbol{u}+K\boldsymbol{E}\right)\right]=0, \tag{3}$$

$$\nabla^2\phi=-q/\varepsilon,\qquad \boldsymbol{E}=-\nabla\phi. \tag{4}$$

这里 $\boldsymbol{u}$ 表示流体速度， p 表示压力， ϕ表示电势， q 表示电荷密度， $\boldsymbol{E}$ 表示电场， ε 表示流体的介电常数， ρ 表示流体质量密度，μ表示动力黏度，而 K 表示离子迁移率。电力仅由库仑力 $q\boldsymbol{E}$产生，因为假设液体处于等温状态。电致伸缩力是标量函数的梯度，因此总可以将其并入压力。在本研究中，我们分析系统的非模态和非线性特性如何影响经典线性稳定性分析的预测；该分析未考虑电荷扩散。因此，我们在式（3）中忽略电荷扩散。

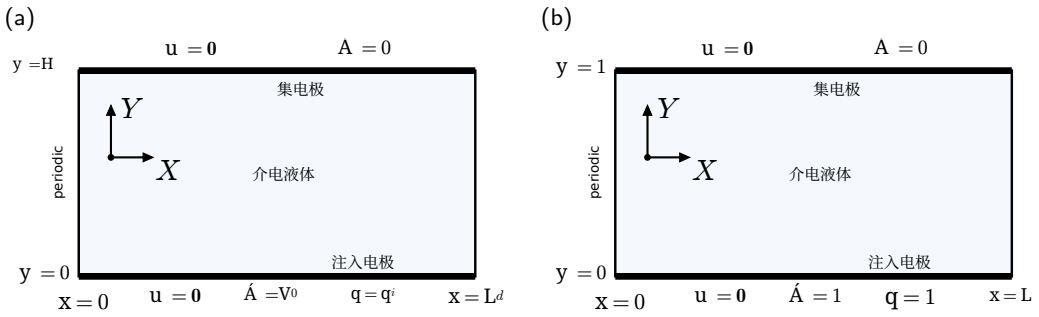

图 2. 电对流问题的区域几何形状与边界条件。(a) 有量纲。(b) 无量纲。

边界条件 [图 2(a)] 为

$$\begin{aligned} y=0: &\quad \boldsymbol{u}=\mathbf{0}, \quad \phi=V_0, \quad q=q_i, \\ y=H: &\quad \boldsymbol{u}=\mathbf{0}, \quad \phi=0, \\ &\quad \boldsymbol{u},\ p,\ q,\ \phi \text{ periodic in } x \text{ with period } L_d. \end{aligned} \tag{5}$$

其中 q_i 是注入电极处的电荷密度， V_0 是外加电压， L_d 是区域的横向周期。在 $y=0$ 处，我们施加无滑移条件、固定电势和给定的注入电荷密度。在 $y=H$ 处，我们施加无滑移条件和接地电势。在水平方向上，该层具有周期性，这模拟了横向无限延伸的层，并允许任意水平相位的扰动。电荷守恒方程 Eq. (3) 是双曲型的，因此只需在电荷输运速度 $\boldsymbol{u}+K\boldsymbol{E}$ 进入区域的位置，即注入器处，设置电荷边界条件。在收集极处，电荷离开区域，因此不施加边界条件。

方程 (1)–(4) 存在一个对应于静水导电态的稳态基态，

$$\boldsymbol{u}_b=\mathbf{0}, \qquad q_b=q_b(y), \qquad \phi_b=\phi_b(y), \tag{6}$$

其中 $q_b(y)$ 和 $\phi_b(y)$ 分别是基态电荷密度分布和电势分布。它们由方程 (3) 和 (4) 的稳态形式确定，化简后为

$$\frac{\mathrm{d}E_b}{\mathrm{d}y}=\frac{q_b}{\varepsilon}, \qquad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}y}\left(q_bE_b\right)=0. \tag{7}$$

其解为

$$\begin{aligned} E_b(y) &= E_i\sqrt{1+\frac{2q_i}{\varepsilon E_i}\,y}, \\ q_b(y) &= q_i\left(1+\frac{2q_i}{\varepsilon E_i}\,y\right)^{-1/2}, \end{aligned} \tag{8}$$

其中， E_i 为注入电极处的电场。通过令层两端的电势降等于外加电压即可计算得出：

$$\begin{aligned} V_0 &= \int_0^H E_b(y)\,\mathrm{d}y \quad \Longrightarrow \\ E_i^2&\left[\left(1+\frac{2q_iH}{\varepsilon E_i}\right)^{3/2}-1\right]=\frac{3q_iV_0}{\varepsilon}. \end{aligned} \tag{9}$$

对该方程进行数值求解，得到 E_i，随后由方程（ $E_b(y)$和$q_b(y)$（8）可得基态分布。

B. 无量纲方程和参数 **rs**

我们选取特征尺度

$$\begin{aligned} &x, y \sim H, \qquad t \sim \frac{H^2}{KV_0}, \quad u \sim \frac{KV_0}{H}, \quad p \sim \frac{\rho K^2 V_0^2}{H^2}, \\ &\phi \sim V_0, \qquad E \sim \frac{V_0}{H}, \quad q \sim q_i. \end{aligned} \tag{10}$$

方程（1）–（4）的无量纲形式为

$$\frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial t} + \boldsymbol{u} \cdot \nabla \boldsymbol{u} = -\nabla p + \frac{M^2}{T} \nabla^2 \boldsymbol{u} + C M^2 q \boldsymbol{E}, \tag{11}$$

$$\nabla \cdot \boldsymbol{u} = 0, \tag{12}$$

$$\frac{\partial q}{\partial t} + \nabla \cdot [q\,(\boldsymbol{u} + \boldsymbol{E})] = 0, \tag{13}$$

$$\nabla^2 \phi = -Cq, \qquad \boldsymbol{E} = -\nabla \phi. \tag{14}$$

除非另有说明，以下所有变量均为无量纲变量。无量纲边界条件 [图 2（b）] 为

$$\begin{aligned} &y = 0: \quad \boldsymbol{u} = \boldsymbol{0}, \quad \phi = 1, \quad q = 1, \\ &y = 1: \quad \boldsymbol{u} = \boldsymbol{0}, \quad \phi = 0, \\ &\qquad \boldsymbol{u},\ p,\ q,\ \phi \text{ periodic in } x \text{ with period } L. \end{aligned} \tag{15}$$

无量纲参数为

$$T = \frac{\varepsilon V_0}{\mu K}, \qquad C = \frac{q_i H^2}{\varepsilon V_0}, \qquad M = \frac{\sqrt{\varepsilon/\rho}}{K}, \qquad L = \frac{L_d}{H}. \tag{16}$$

电瑞利数 T 表示电力与黏性力之比，并将作为稳定性参数。注入数 C 表征电荷注入的强度。迁移率数 M 是流体动力迁移率与离子迁移率[1] 之比，仅取决于流体的性质。最后， L 是该层的纵横比。

无量纲基态为

$$\begin{aligned} q_b(y) &= \left(1 + \frac{2C}{E_i}\, y\right)^{-1/2}, \\ E_b(y) &= E_i \left(1 + \frac{2C}{E_i}\, y\right)^{1/2}, \end{aligned} \tag{17}$$

其中，注入极场 E_i 由以下公式确定

$$\frac{E_i^2}{3C} \left[\left(1 + \frac{2C}{E_i}\right)^{3/2} - 1 \right] = 1. \tag{18}$$

基态压力平衡库仑力， $p_b(y) = CM^2 E_i\, y$。

按照式（10）中的尺度，离子相对于流体的漂移速度为 $\boldsymbol{E}$，速度以漂移速度尺度 KV_0/H 来度量。弱注入时， $E_b \simeq 1$ 贯穿整个层，因此单位速度就是局部漂移速度。强注入时则并非如此。对于 $C = 10$ ，静电场从注入器处的 $E_i = 0.11$ 增至收集极处的 1.49 ，接近空间电荷限制分布 $\frac{3}{2}\sqrt{y}$，局部漂移速度也相应变化。然而，在任何状态下，无论是导电状态还是对流状态，其在整个层上的平均值都恰好为一，因为 $\int_0^1 E_y \,\mathrm{d}y$ 是外加电压。流体的最大速度 $U_{\max} > 1$

因此意味着流动速度超过平均离子漂移速度，因而对流在输运电荷时与迁移相竞争。下文将这种比较用作指标，而非局部判据。由于 $\boldsymbol{E}$ 是无旋的，输运速度 $\boldsymbol{u}+\boldsymbol{E}$ 只有在流动克服局部漂移的区域才可能形成闭合轨道。在层的核心区域， E_b 接近一，因此这要求 $U_{\max}$ 达到一的量级。电荷满足 $\partial_t q + (\boldsymbol{u}+\boldsymbol{E})\cdot\nabla q = -Cq^2$，因此沿着 $\boldsymbol{u}+\boldsymbol{E}$的轨道单调递减。在稳态下，电荷必定在闭合轨道上消失，因为注入器无法向这些轨道供给电荷。这就形成了第 VD节讨论的电荷空洞。

C. 线性模态稳定性

在线性稳定性分析中，通过引入无穷小扰动对控制方程进行线性化。所得线性化方程决定这些扰动的增长或衰减，而失稳起始则定义为出现中性扰动，即既不增长也不衰减的扰动。扰动是相对于基态定义的，

$$\begin{aligned} \boldsymbol{u}' &= \boldsymbol{u}, & q' &= q - q_b(y), \\ \phi' &= \phi - \phi_b(y), & p' &= p - p_b(y), \end{aligned} \tag{19}$$

并设为以下形式

$$(\boldsymbol{u}', p', \phi', q') = (\hat{\boldsymbol{u}}, \hat{p}, \hat{\phi}, \hat{q})\exp(\sigma t), \tag{20}$$

其中 σ 为时间增长率。当所有可容许扰动均满足 $\mathrm{Re}\,\sigma < 0$时，基态是线性稳定的。在本问题中，稳定性交换原理适用；Atten 和 Moreau 已证明该原理[8] 对弱注入成立，并已通过数值计算验证其对强注入也成立（第 VI节），因此临界状态可由 $\sigma = 0$获得。在此条件下，迁移率参数 M 从线性稳定性问题中消去，阈值仅取决于注入参数、纵横比和 T。

对于水平方向无限延伸的层，平移不变性允许将扰动分解为傅里叶模态，

$$(\boldsymbol{u}', p', \phi', q') = \Big(\hat{\boldsymbol{u}}(y), \hat{p}(y), \hat{\phi}(y), \hat{q}(y)\Big)\exp(\mathrm{i}kx + \sigma t). \tag{21}$$

对于每个水平波数 k，线性化方程定义了关于 T 的特征值问题。中性曲线 $T = T(k)$ 给出了使波数为k 的扰动达到中性稳定状态的取值，而经典线性阈值为

$$T_c = \min_k T(k), \qquad k_c = \arg\min_k T(k). \tag{22}$$

这基本上就是 Atten 和 Moreau[8]在经典分析中采用的方法。不稳定性源于空间电荷的对流位移与由此产生的电场扰动所生成的库仑力之间的耦合。临界值强烈依赖于注入强度 C。特别是，Atten 和 Moreau 得出了弱注入和强注入极限下著名的线性阈值。

Pérez 等人[24] 通过使用有限元直接求解线性化偏微分方程，扩展了这一表述。当引入刚性侧壁时，这种做法就成为必要，因为扰动无法再分解为仅依赖于 x 和 y的独立函数。经过空间离散化后，中性稳定性方程可写成广义特征值形式

$$\mathsf{A}\boldsymbol{x} = T\,\mathsf{B}\boldsymbol{x}, \tag{23}$$

其中，特征向量 $\boldsymbol{x}$包含离散的速度、压力、电势和电荷密度扰动。因此，该计算不仅给出了 T的临界值，还提供了相应线性特征模态的完整空间结构。

表 I。周期层中的离散模态阈值 T_c^h（$C = 10$, $L = 1.228$），用于第 III C 节的离散化。

每个滚胞的网格单元	层内网格单元数 未知量		T_c^h
31×50	62×50	43 896	163.024
47×75	94×75	99 452	163.625
62×100	124×100	174 592	163.822
93×150	186×150	392 088	163.958
$h \to 0$ ($p = 2.10$)			164.06

对于 $C = 10$ 和对称侧壁，Pérez 等人[24] 得到了宽度为 $L_c = 0.614$的单个涡卷的 $T_c = 164.09$ ，即临界波长的一半，这与 Atten 和 Moreau[8]的$T_c \simeq 164.1$ 和 $L_c \simeq 0.614$ 一致。

在本研究中，所有计算（模态和非模态）均在一个临界波长的横向周期层中进行，$L = 2L_c = 1.228$其中包含两个反向旋转的滚胞。中性稳定问题，式（23），由与优化（第 IIIC 节）所采用的相同离散化组装而成。该算子是在基态处对时间步进器的离散残差进行的精确线性化，其中包括 SUPG 稳定化。因此，其最小特征值 T_c^h就是优化所求解的半离散问题的阈值，因而第 IVB 节的非模态阈值必须收敛于此。

周期层中的问题在水平平移以及反射（x, u） $\mapsto$ （$-x$, $-u$）下保持不变。由于各场具有 L-周期性， x 可以视为一个角度，即 $\theta = 2\pi x/L$，因此平移 $x \mapsto x + a$ 就是将该圆旋转 $2\pi a/L$。结合反射，这些旋转构成群 O(2)。对于波数为 k 的模态，$\boldsymbol{z}' = A\hat{}\boldsymbol{z}$（$y$） $e^{\mathrm{i}kx} + \text{c.c.}$，平移会将复振幅乘以 $e^{\mathrm{i}ka}$，即旋转 $^-$对（Re A, Im A），而反射则将 A 映射为 A。由于该平面上的任意方向都可以旋转到其他任意方向，因此每个具有 $k \neq 0$ 的模态的特征值都是二重的，临界特征空间由具有任意水平相位[25,26]的滚胞组成。由于反射对称性和稳定性交换[8], ，它们是稳态的。在均匀周期网格上（如本研究所采用的网格），对称群缩减为由整网格单元平移和反射生成的二面体群，但临界特征值仍保持严格二重性。

表 I 列出了 T_c^h四种网格。阈值以观测阶数 $p = 2.10$ 单调收敛至 $T_\infty = 164.06$，与已发表值的差异在0.02% 以内。本文其余部分采用的生产网格包含 62×100 每个滚胞的网格单元，所得结果为 $T_c^h = 163.82$，低于0.14% 的 T_∞。作为交叉检查，Pérez 等人的[24] （三角形单元，P_2 电荷，无稳定化，$h = 0.01$）离散化在周期层中给出 $T_c = 163.92$ ，低于已发表值0.1% 。

图 3 显示了生产网格上的临界模态。电荷扰动由符号交替、贯穿整个层的垂直柱组成，其最大值位于$y \simeq 0.6$ ，而注入器旁侧有符号相反的薄层；速度场由两个反向旋转涡卷组成。电荷扰动关于每个涡卷的中心呈反对称。

III. 非模态非线性稳定性分析

A. 优化问题

非线性非模态分析的目标是确定一种初始扰动，使给定的目标泛函在预先指定的目标时刻 τ 达到最大值，我们将该时刻称为时间范围。优化问题由控制方程、初始扰动幅值和目标泛函定义。

我们仅考虑电荷的初始扰动，速度初始时处于静止状态。这一选择模拟了注入电荷的涨落，它们是

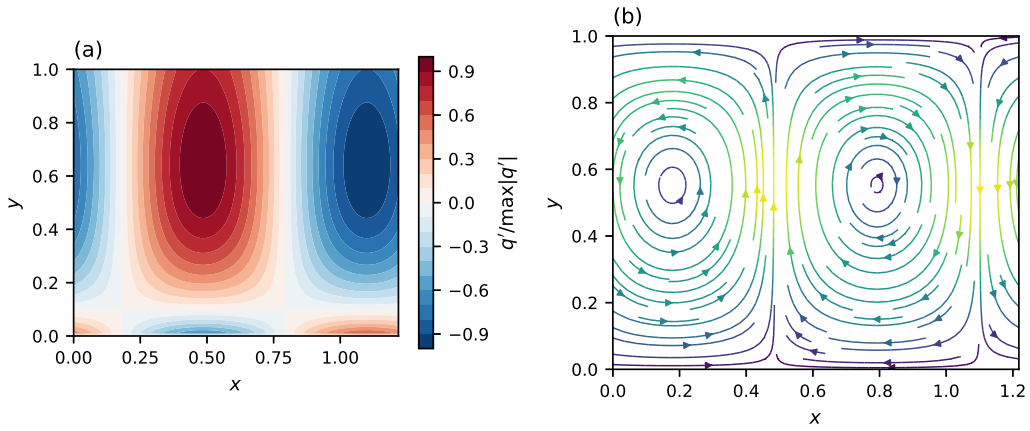

图 3. 周期层中的临界特征模态（$C = 10$、 $L = 1.228$、 62×100 每个滚胞的网格单元，$T_c^h = 163.82$）。(a) 电荷密度扰动。(b) 速度扰动的流线，按速度着色。水平相位是任意的。

静水态的自然扰动。初始振幅通过以下方式规定：

$$E_0 = \int_\Omega (q_0')^2 \, \mathrm{d}\Omega. \tag{24}$$

这里 Ω 是计算域，其边界为 $\partial\Omega = \Gamma_i \cup \Gamma_c \cup \Gamma_s$，其中 Γ_i 和 Γ_c分别表示注入电极和收集电极， Γ_s 表示侧向（周期性）边界。控制量 q_0' 是相对于基态 $q_b(y)$ 的扰动。由于基态是静水的，我们选择目标时刻的总动能作为目标泛函，

$$J(\tau) = \frac{1}{2} \int_\Omega |\boldsymbol{u}(\tau)|^2 \, \mathrm{d}\Omega, \tag{25}$$

并通过增益来衡量初始扰动的放大

$$G_q(\tau) = \frac{J(\tau)}{E_0}. \tag{26}$$

由于 G_q 将动能与电荷范数进行比较，其数值取决于方程（10）的尺度以及参数 C 和 M。因此，它不能直接与 Zhang 等人[10]，的能量增益进行比较，因为其范数结合了速度扰动和电荷扰动。优化问题为

$$\max_{q_0'} J(\tau) \quad \text{subject to} \quad \int_\Omega (q_0')^2 \, \mathrm{d}\Omega = E_0. \tag{27}$$

为获得目标泛函相对于初始电荷扰动的梯度，我们采用拉格朗日方法[16]。通过伴随场 $\boldsymbol{u}^\dagger$、 $p^\dagger$、 $q^\dagger$ 和 $\phi^\dagger$施加控制方程，它们分别与动量方程、不可压缩性、电荷守恒和泊松方程相关联。增广拉格朗日量

is

$$
\begin{aligned}
\mathcal{L} = J &- \lambda \left(\int_\Omega (q_0')^2 \, \mathrm{d}\Omega - E_0 \right) \\
&- \int_0^\tau \int_\Omega \boldsymbol{u}^\dagger \cdot \left[\frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial t} + (\boldsymbol{u} \cdot \nabla)\boldsymbol{u} + \nabla p \right. \\
&\qquad \left. - \frac{M^2}{T} \nabla^2 \boldsymbol{u} - C M^2 q \boldsymbol{E} \right] \mathrm{d}\Omega \, \mathrm{d}t \\
&- \int_0^\tau \int_\Omega p^\dagger \, \nabla \cdot \boldsymbol{u} \, \mathrm{d}\Omega \, \mathrm{d}t \\
&- \int_0^\tau \int_\Omega q^\dagger \left[\frac{\partial q}{\partial t} + \nabla \cdot (q(\boldsymbol{u} + \boldsymbol{E})) \right] \mathrm{d}\Omega \, \mathrm{d}t \\
&- \int_0^\tau \int_\Omega \phi^\dagger \left(\nabla^2 \phi + C q \right) \, \mathrm{d}\Omega \, \mathrm{d}t,
\end{aligned}
\tag{28}
$$

其中 λ 是与振幅约束相关联的拉格朗日乘子。要求 $\mathcal{L}$ 对于直接变量的任意可容许变分 $\boldsymbol{u}$、p、q 和 ϕ的一阶变分均为零，即可得到伴随方程和边界条件。详细推导见附录 A，其中还给出了伴随方程和边界条件的最终形式。

B. 优化算法

通过直接–伴随迭代进行非线性优化。从一个满足方程（ q_0' 24）的可行初始电荷扰动 $t = 0$ 出发，将非线性正问题从 $t = \tau$ 向前积分至 $t = \tau$，并计算目标泛函（方程（25））。然后将伴随方程从 $t = 0$时间反向积分至 J，以求得目标函数 $t = 0$ 关于初始扰动的梯度，

$$
g = \frac{\delta J}{\delta q_0'}. \tag{29}
$$

此处， g 是 L^2 目标函数 J[27]导数的 Riesz 表示元。伴随方程将该导数表示为初始扰动 q_0' 变化量的线性泛函，而 g 则是在 L^2 内积下表示该泛函的函数；此内积与定义振幅约束的内积相同（方程（24））。控制空间为$\mathcal{A} = \{q_0' : \ q_0' = 0 \text{ 在 } \Gamma_i\}$，因此离散化后， g是满足注入器处齐次狄利克雷条件的质量矩阵问题的解。使用质量矩阵，而非直接使用关于自由度的导数，可使梯度不依赖于网格[28]。

由于控制受式（24）所定义的超球面约束，只有与该流形相切的梯度分量才是可行的。投影梯度为

$$
g_T = g - \frac{\langle g, q_0' \rangle}{\langle q_0', q_0' \rangle} \, q_0' = g - \frac{\langle g, q_0' \rangle}{E_0} \, q_0'. \tag{30}
$$

控制沿着与球面相切的上升方向 d 进行更新，

$$
\tilde{q_0'} = q_0' + \alpha d. \tag{31}
$$

在最简单的算法中， d 的值使用最速上升 $d = g_T$计算。在本研究中， d 使用黎曼有限记忆 BFGS 方法[29,30], 计算，步长 α 则通过 Armijo 回溯线搜索[31,32]选取。更新后的

pe扰动被投影回常

约束，

$$q_0' \leftarrow \sqrt{\frac{E_0}{\int_\Omega (\tilde{q}_0')^2 \,\mathrm{d}\Omega}}\,\tilde{q}_0'. \tag{32}$$

重复进行正向积分、反向伴随积分、梯度投影、线搜索和重新归一化，直到投影梯度足够小。通过以下比值监测收敛性

$$\frac{\|g_T\|}{\|g\|}, \tag{33}$$

该比值在约束驻点处趋于零。当 $\|g_T\|/\|g\| \leq 10^{-4}$ 时，即认为已经收敛。接近最优解时， J 中的误差与该比值的平方成正比，因此此时 G_q 的精度可高于 10^{-7}。在解析初始猜测以及收敛后的最优解处，分别在线性区间和有限振幅下，通过泰勒测试验证了伴随梯度。在所有情况下，泰勒余项均以 2.00 的速率收敛，同一轨迹上的两个伴随解彼此一致至 10^{-15}，且里斯映射能够将离散导数复现至舍入误差范围内。

C. 离散化与离散伴随

梯度，即式（29），通过 Python 库 Pyadjoint 自动生成的离散伴随获得[22] 该离散伴随源自正问题的 Firedrake 实现[21]。选择这一自动微分框架促成了正问题的整体式表述。

由于方程具有鞍点结构，通常采用分裂方法对不可压缩流进行时间积分。然而，分裂格式的伴随并不等于伴随方程的分裂，而投影格式的伴随也不是投影格式。因此，我们对直接问题采用整体式 formulation。方程（11）–（14），连同方程（15）的边界条件，在时间上离散为一个单一系统，并在每个时间步对速度、压力、电势和电荷密度进行全耦合求解。未知量为相对于方程（17）基态的扰动场 $\boldsymbol{z}' = (\boldsymbol{u}', p', q', \phi')$ 。令 $\mathcal{R}(\boldsymbol{z})$表示完整方程（11）–（14）的离散残差，则每个时间步求解

$$\mathcal{R}'(\boldsymbol{z}') \equiv \mathcal{R}(\boldsymbol{z}_b + \boldsymbol{z}') - \mathcal{R}(\boldsymbol{z}_b) = 0, \tag{34}$$

其中， $\boldsymbol{z}_b$ 是插值后的基态。减去离散基态残差后， $\boldsymbol{z}' = 0$成为离散问题的精确解。若不进行此减法，基态的插值误差将产生伪强迫。

区域为周期层 $[0, L) \times [0, 1]$ 其中 $L = 1.228$，包含一个临界波长（两个涡卷），并采用结构化四边形网格进行离散化。该网格在平移一个网格单元的水平平移以及反射 $x \mapsto -x$下保持不变。我们使用 Q_2 元表示速度和电势，使用 Q_1 元表示压力和电荷密度。由于忽略扩散，电荷输运方程（式（13））为双曲型，其离散化通过流线迎风 Petrov–Galerkin（SUPG）项[33] 进行稳定化，该项的参数与时间步长无关

$$\tau_{\mathrm{SUPG}} = \left[\left(2|\boldsymbol{v}_q|/h_K \right)^2 + (2Cq)^2 \right]^{-1/2}, \quad \boldsymbol{v}_q = \boldsymbol{u} - \nabla\phi, \tag{35}$$

其中 h_K 为网格单元直径。时间积分采用二阶后向差分公式（BDF2），并以一个后向欧拉步[34,35]启动。每一步均使用牛顿法求解整体非线性系统，并采用直接（LU）线性求解器。直接问题和伴随问题中的压力零空间均被消除，并且会检测零主元

LU分解中是否存在零主元会被显式检测。若不采取这项保护措施，奇异的伴随系统偶尔会返回错误的梯度。完整的弱形式见附录 B。

在正向积分过程中，Pyadjoint 会在磁带上记录每一项会对 J产生影响的操作，即初始扰动的插值、每个非线性时间步，以及目标泛函的组装。每个时间步都记录为一个单独的块，该块由其变分形式中的残差定义，而非由求解该时间步所使用的牛顿迭代定义。在反向遍历中，磁带会被反向遍历。对于每个时间步，通过对变分形式进行符号微分，得到残差关于该步未知量的雅可比矩阵，并组装其转置。随后，该步的伴随变量通过求解一个线性系统得到，该系统的系数矩阵为转置后的雅可比矩阵，右端项汇集了从后续时间步以及 J传播而来的灵敏度。因此，反向积分是线性的，每个伴随时间步只需进行一次线性求解，而对应的正向时间步则需要进行多次牛顿迭代。遍历的结果是离散目标泛函关于 q_0'自由度的导数，这是一个线性泛函；通过第 IIIB节中的里斯映射，可以由此得到梯度 g 。

由于伴随方程是从实际求解的离散方程推导出来的，因此包含转置后的 SUPG 项，而附录 A的连续伴随方程中并未出现这些项。因此，优化与数值正向问题在内部保持一致，而是否收敛到连续优化问题，则必须通过空间和时间加密来评估。

D. 振幅度量、对称性与计算配置

振幅以初始电荷能量 E_0 （方程（24），在整个层（$|\Omega| = L = 1.228$上积分）表示。为便于物理解释，我们还给出初始电荷扰动均方根

$$q'_{\mathrm{rms}} = \left(\frac{E_0}{|\Omega|} \right)^{1/2}, \tag{36}$$

其单位为注入电荷密度 q_i。

方程（11）–（14）、基态和周期网格在反射 P： $x \mapsto -x$ （模 L）下保持不变；在该反射下，$(u_x, u_y) \mapsto (-u_x, u_y)$，而 p, q, ϕ 会映射为其镜像。因而，P偶对称场构成的子空间在完整的非线性演化下保持不变。它恰好对应于 Pérez 等人[24],所述带对称壁的单个涡卷，而周期层将其作为一个特例包含在内。P奇对称子空间仅在线性化动力学下保持不变，因为 $q' \mapsto -q'$ 不是方程（13）中二次项的对称性。有限振幅优化以种子 $y[\cos kx + \frac{1}{2}$ $\sin 2kx]$,$k = 2\pi/L$为初始条件；该种子不具有反射轴，因此优化器能够打破反射和平移对称性。

除非另有说明，所有结果均采用 $C = 10$、 $M = 10$，将周期层离散为 62×100 每个滚胞的网格单元数（层内为124×100 ）以及 $\Delta t = 0.02$。第IV 节表明，该分辨率使最优增益产生约0。02% （空间）和0。2% （时间）误差，并将阈值移动至 $T_c^h = 163.82$。为使每种情形与阈值保持预定距离，电瑞利数均相对于离散阈值给出。以 $\Delta T = T_c - T$定义的情形在 $T = T_c^h - \Delta T$处计算。具体而言，验证和第V节中的参考亚临界情形 $\Delta T = 4.1$ （即 $T = 160$ 当$T_c = 164.09$时），在 $T = 159.73$处计算。

表 II。最优增益的空间收敛性（$T = 158.93$、 $E_0 = 10^{-8}$、 $\tau = 0.4$、 $\Delta t = 0.02$）。

每个卷胞的网格单元	G_q	与最精细网格的相对差异（%）
31×50	629.564	0.099
62×100	629.037	0.015
124×200	628.941	0

TA表 III。生产网格上最优增益的时间收敛（$T = 159.7$ 3, $E_0 = 10^{-8}$、 $\tau = 0.4$）。

Δt	N_t	G_q	与最精细网格的相对差异（%）
2.0×10^{-2}	20	640.503	0.179
1.0×10^{-2}	40	641.403	0.038
5.0×10^{-3}	80	641.596	0.008
2.5×10^{-3}	160	641.639	0.002
1.25×10^{-3}	320	641.649	0

IV. 数值验证

A. 空间和时间收敛

采用小振幅优化（$E_0 = 10^{-8}$、 τ =0。4）评估离散化。表II 显示了在固定 $T = 158.93$ 、 $\Delta t = 0.02$处三个依次加倍的网格上的最优增益。增益以约2。5的观测阶单调收敛。生产网格（62×100 每个滚胞的网格单元数）与最细网格相差0。015%，而最粗网格（31×50）相差0。10%。

表 III 展示了参考值$T = 159.73$下生产网格上的时间收敛性。每次将 Δt减半时，差异都缩小四倍，观测阶数为2.09，符合 BDF2 的预期。理查森外推得到 $G_q = 641.652$。在工作时间步 $\Delta t = 0.02$下，时间误差为0.18%，这是生产计算中的主要离散化误差。

B. 线性振幅极限的确定和线性失稳阈值的恢复

在线性化问题中，时刻 τ 的速度与 q_0'成正比，因此 J 和 E_0 都关于 q_0' 的振幅呈二次关系；当 $E_0 \to 0$时，增益变得与 E_0 无关。表 IV 和图 4 展示了阈值附近（$T = 163.73$、 $\Delta T = 0.1$）在$\tau = 1.5$、2、2.5 以及三种振幅下的最优增益。在 $E_0 = 10^{-10}$ 和 10^{-8} 之间，增益的变化至多为 0.017%；而 $E_0 = 10^{-6}$ 已经偏离 1.1–1.8%，且偏离程度随 τ增加。因此，我们使用 $E_0 = 10^{-8}$ 来表示线性区间。

在振幅较小、时间范围较长时，最优响应由最不稳定特征模态主导，因此

$$J_{\mathrm{opt}}(\tau) \simeq A(T) \exp\left[2\sigma(T)\tau\right]. \tag{37}$$

T表 IV. 阈值附近最优增益随初始振幅的变化（$T = 163.73$，生产网格).

τ	$G_q(10^{-10})$	$G_q(10^{-8})$	$G_q(10^{-6})$	$\frac{G_q\,(10^{-8}) - G_q\,(10^{-10})}{G_q(10^{-10})}$ (%)
1.5	754.283	754.364	762.536	0.011
2.0	752.134	752.240	762.973	0.014
2.5	750.162	750.292	763.485	0.017

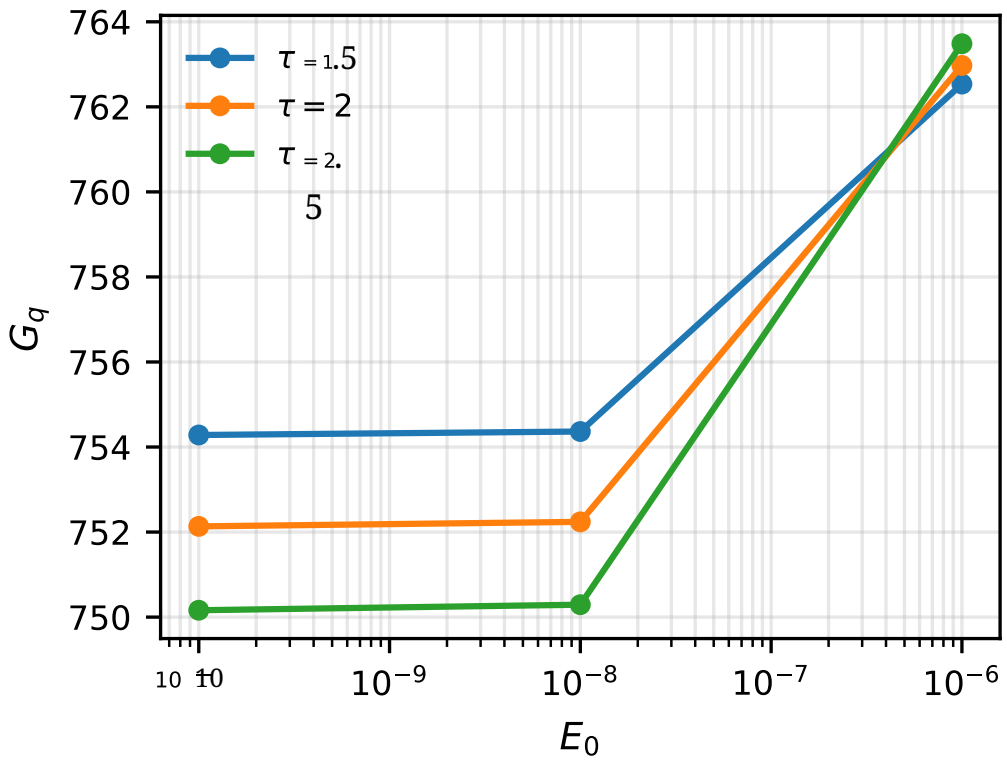

图 4. 阈值附近（$T = 163.73$）最优增益随初始电荷能量 E_0 的变化，针对三个时间范围。

表 V. 生产网格（$E_0 = 10^{-8}$, $\Delta t = 0.02$）上的渐近增长率，拟合区间为 $\tau \in \{1.5, 2, 2.5\}$。

T	σ_{NM}	R^2
162.73	-3.092×10^{-2}	0.999995
163.23	-1.679×10^{-2}	0.999985
163.73	-2.707×10^{-3}	0.999419
164.23	$+1.133 \times 10^{-2}$	0.999967
$T_c^{\mathrm{NM}} = 163.827,$		$T_c^h = 163.822$

渐近增长率由 $\ln(J_{\mathrm{opt}}) = a + b\tau$ 对 $\tau \in \{1.5, 2, 2.5\}$ 和 $\sigma_{\mathrm{NM}} = b/2$进行最小二乘拟合得到。图 5(a) 展示了 $E_0 = 10^{-8}$ 以及离散阈值附近四个 T取值对应的拟合结果。所有决定系数均大于 0.9994。增长率与 T 呈线性关系，斜率为 $\mathrm{d}\sigma_{\mathrm{NM}}/\mathrm{d}T = 0.0282$ [，如图 5(b) 和表 V], 所示，其零点给出非模态阈值

$$T_c^{\mathrm{NM}} = 163.827, \tag{38}$$

与同一网格的离散模态阈值相差 $T_c^h = 163.822$ 仅0。003%。因此，直接-伴随优化几乎精确地恢复了其自身离散化下的模态阈值，而 T_c^h 的网格收敛（表I）则使其达到连续情形的数值。

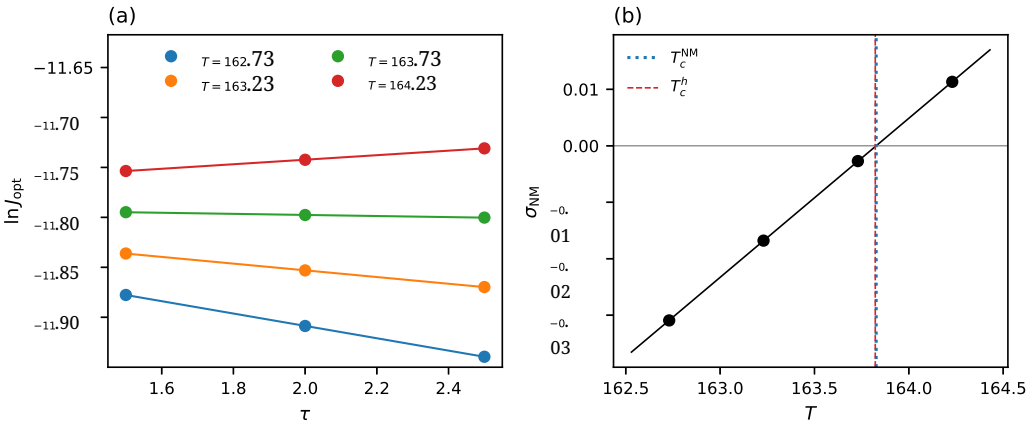

图 5. 线性阈值的恢复。（a）$\ln(J_{\rm opt})$与 τ的关系及最小二乘拟合（$E_0 = 10^{-8}$）。（b）$\sigma_{\rm NM}$ T $T_c^{\rm NM} = 163.827$ $T_c^h = (\,)$。点线：零点。虚线：离散模态阈值。163.822

V. 非线性最优扰动

有限振幅计算在 $T = 159.73$ （$\Delta T = 4.1$，线性稳定）条件下，对以下时间范围进行：$\tau \in \{0。1，0。5，1，1。5，2\}$。对于每个时间范围，振幅优化都继续进行，依次取值为 $E_0 = 10^{-8}$、10^{-7}、.....、10^{-4}；每个阶段都从前一阶段的最优解开始，第一阶段则从第 III D 节的对称性破缺初始扰动开始。所有优化均收敛至 $\|g_T\|/\|g\| < 10^{-4}$。

A. 有限振幅最优增长

图 6 显示了归一化为其小振幅值$G_{\rm NL} = G_q/G_q^{\rm lin}$的最优增益 $G_q = J_{\rm opt}/E_0$，以及下文定义的结构相似性。在线性区间内，最优增益随 τ变化并非单调。对于 $\tau = 0.1$，其取值分别为 $G_q^{\rm lin} = 368.7$、0.5、1、1.5 和 2 时，最优增益分别为 684.6、601.2、539.9 和 480.3。瞬态放大在 $\tau \approx 0.5$附近达到峰值，随后该线性稳定态的响应以渐近速率 $\sigma_{\rm NM} < 0$ 衰减。

在 $E_0 \simeq 10^{-6}$ 以内，对于所有时间范围，增益与振幅无关，偏差不超过 1.3%。振幅较大时，各时间范围之间出现差异。在 $E_0 = 10^{-5}$、$G_{\rm NL} = 1.07$ 时，对于 $\tau = 1$ 分别为 1.11 和 1.14；在 1.5 和 2 时，以及在 $E_0 = 10^{-4}$、$G_{\rm NL} = 1.66$ 时，分别为 2.62 和 4.29。对于最短的时间范围，非线性没有时间发挥作用；在最大振幅下，$G_{\rm NL} = 0.999$ ($\tau = 0.1$)，而 1.003 ($\tau = 0.5$)。在 $E_0 = 10^{-4}$ 和 $\tau = 2$ 时，最大速度在 $t = \tau$ 达到 $U_{\max} = 1.10$，即达到漂移速度尺度的量级。最优扰动在该时间范围内推动层趋向对流态。

B. 有限振幅最优扰动的结构

在周期层中，最优解的每个平移仍然是最优解，因此通过对平移取最大值的相关性来衡量不同振幅下最优解之间的相似性，

$$|\mathcal{C}(E_0,\tau)| = \max_{s\in[0,L)} \frac{\left|\langle q_0'(x+s,y;E_0,\tau),\, q_0'(x,y;E_{0,\rm ref},\tau)\rangle\right|}{\|q_0'(E_0,\tau)\|\,\|q_0'(E_{0,\rm ref},\tau)\|}, \tag{39}$$

当 $E_{0、\,\rm ref} = 10^{-8}$ 时，相关性始终高于 0.997，直到 $E_0 = 10^{-6}$，并在 $E_0 = 10^{-4}$ [图6(b)]处，当 $\tau = 0.5$、1、1.5 和 2 时分别降至 0.93、0.89、0.87 和 0.86。这意味着

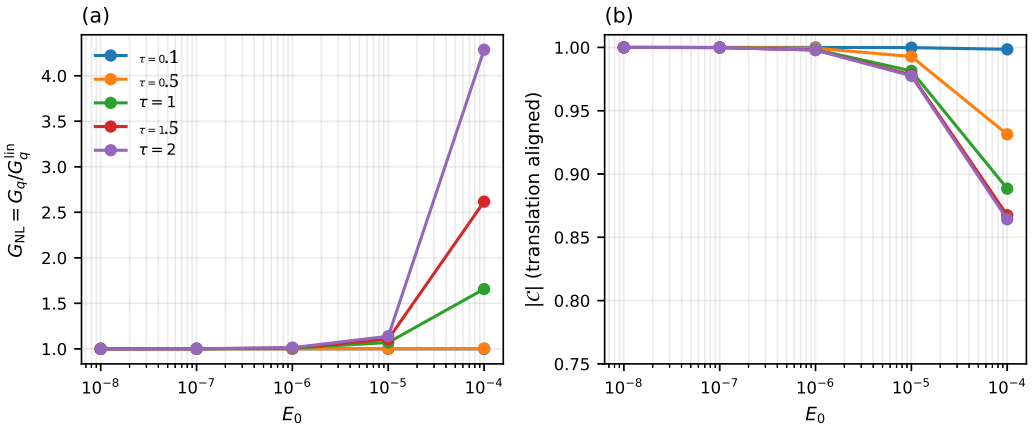

图 6. $T = 159.73$处有限振幅最优增长。(a) 相对于小振幅最优解的最优增益归一化值。(b) 振幅为 E_0 时的最优扰动与小振幅最优解之间的式（39）所定义的平移对齐相关性。

最优扰动的结构会随初始扰动的振幅而变化。

图 7 展示了 $\tau = 1$时的这一变化。小振幅最优解（$E_0 = 10^{-8}$）是单一水平傅里叶模态，集中在注入器附近。最大值位于$y \simeq 0.25$，远低于临界特征模态（图 3），且正负瓣强度相同（最大值 $q_0' = 2.17 \times 10^{-4}$，最小值$q_0' = -2.20 \times 10^{-4}$）。当 $E_0 = 10^{-4}$时，最优解的正负符号呈现显著不对称。它由一个紧凑的电荷亏损区（最小值 $q_0' = -3.95 \times 10^{-2}$）构成，两侧是较弱的过量区域（最大值$q_0' = 1.10 \times 10^{-2}$）。这种不对称性体现在水平傅里叶成分中：包括一个水平向均匀分量 $k_0 = 0$、层体主体中的电荷亏损，以及一个二次谐波 $k_2 = 2k$ [（图 7(c) 和 7(d)）]。其能量占比随 E_0线性增长，符合基频模态二次相互作用的预期；当 $\tau = 1$ 且 $E_0 = 10^{-4}$ 时，二者分别达到扰动能量的 3.3%（k_0）和 13.4%（k_2）（ $\tau = 0.5$时分别为 6.7% 和 4.2%）。基频与 k_2相互作用产生的三次谐波 $k_3 = 3k$是振幅的三阶项，其能量占比按E_0^2增长：从 $E_0 = 10^{-8}$ 时的 1.8×10^{-9} 增长到 $\tau = 1$时、$E_0 = 10^{-4}$ 处的 2.4%。在 $E_0 = 10^{-5}$与 10^{-4} 之间，所有占比均偏离这些幂律（二次谐波增长了 4 倍，而非 10 倍），基频仅占扰动能量的 80%。在此振幅下，最优轨迹在时间范围内达到 $U_{\max} = 0.80$，接近漂移速度尺度，高阶相互作用已不再微弱。

尽管种子和优化器允许这种情况，但没有任何最优解会破坏反射对称性。对于所有振幅和时间范围，关于最佳反射轴呈奇对称的能量占比始终低于 5×10^{-8}。在 $E_0 = 10^{-4}$，$\tau = 1$处直接从对称性破缺初始扰动出发（不进行延拓）的单阶段优化，收敛到 $G_q = 996.117$，与延拓得到的数值相同，且 $\|g_T\|/\|g\| = 7 \times 10^{-6}$。因此，有限振幅最优解是镜像对称的，并且与相同单个涡卷振幅下、带有对称壁的单个涡卷的最优解一致。

C. 非线性机制：电荷过剩与电荷亏缺之间的不对称性

符号不对称性可追溯到电荷方程的非线性部分。利用式（14）和（12），式（13）可写为 $\partial_t q + (\boldsymbol{u} + \boldsymbol{E}) \cdot \nabla q + Cq^2 = 0$。代入 $q = q_b + q'$和$\boldsymbol{E} = \boldsymbol{E}_b + \boldsymbol{E}'$，再减去基态，得到

$$\partial_t q' + (\boldsymbol{u} + \boldsymbol{E}_b + \boldsymbol{E}') \cdot \nabla q' + (\boldsymbol{u} + \boldsymbol{E}') \cdot \nabla q_b = -\,C\,(2q_b + q')\,q'. \tag{40}$$

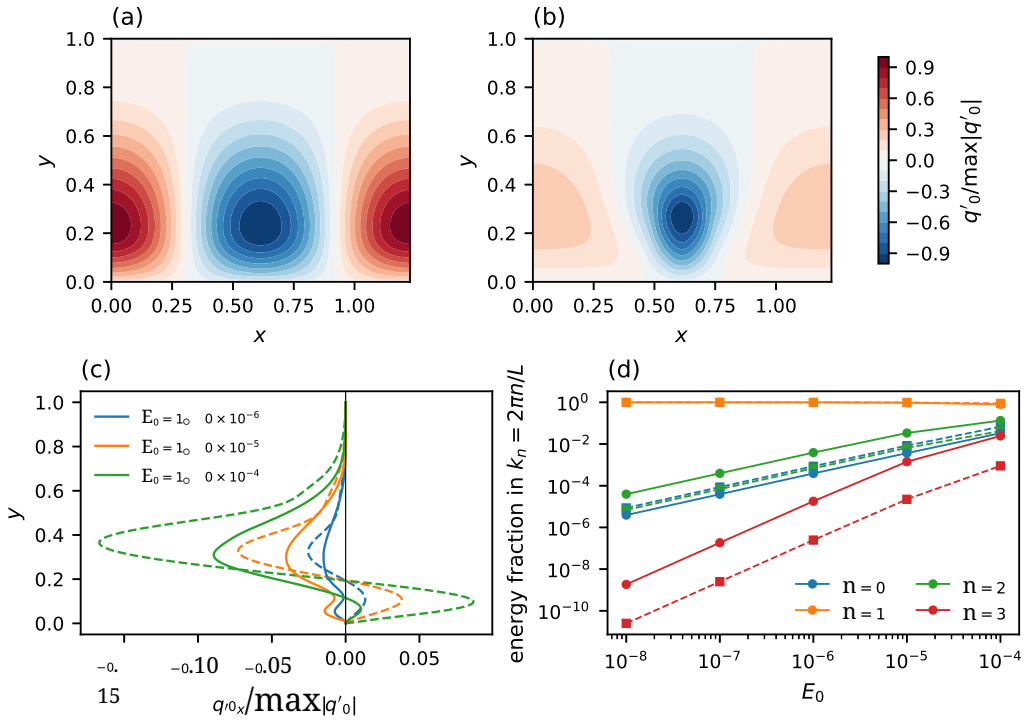

图 7 10^{-8} $\tau = 1$ $E_0 = 10^{-4}$ $\tau = 1$ $E_0 =$ 。 $|q'_0|$ $T = 159.73$处的最优初始电荷扰动。（a）小振幅最优解，和。（b）有限振幅最优解，和。二者均按 max 归一化。（c）对于三个最大振幅，$\tau = 1$（实线）和 $\tau = 0.5$（虚线）的水平平均值 $\langle q'_0\rangle_x(y)/\max|q'_0|$。（d）扰动能量中位于水平波数 $k_n = 2\pi n/L$ 的部分，线型相同。

右端表示扰动电荷的库仑自斥。对于幅值相同的电荷过剩（$q' > 0$）和电荷亏损（$q' < 0$），前者的局部弛豫率 $C(2q_b + q')$ 更大。在线性化问题中，两种符号对应的局部弛豫率均为 $2Cq_b$，这正是线性最优具有对称叶瓣的原因。在有限振幅下，电荷亏损的弛豫较慢，因此持续时间更长，能够改变驱动滚胞的库仑力。

通过反转最优解的符号可以检验这一解释；反转后，其空间结构和振幅保持不变，但电荷亏损变为电荷盈余。在刚超过临界振幅（$E_0 = 3.492 \times 10^{-5}$，0.4% 高于 E_0^c，第VD 节）时，最优解达到对流态，而其符号反转态则衰减至静止状态，并未接近边缘态 [图13（a）]。第VE 节表明，这两个符号在第一个时间单位内便会分离。

D. 最小种子

当 T 介于 T_{NL} 与线性阈值之间时，静水态和对流态都稳定（图 1）。最小种子是从静水态出发、能够到达对流态的最小初始扰动。其振幅 $E_0^c(T)$衡量静水态的稳健程度。遵循 Pringle 和 Kerswell[13] 的方法，通过最优扰动从下方逼近该振幅。对于每个振幅，计算并演化使 $J(\tau)$ 在 $\tau = 1$ 下达到最大值的扰动，直至 $t_{\mathrm{end}} = 20$ (40 或 60，视需要而定，见下文）。振幅先按数量级扫描，再通过二分法在 $\log E_0$空间中确定区间；每一步都从最近的未发生转变的最优解重新开始。当轨迹在 t_{end}时的最大流体速度超过漂移速度尺度，即判定其发生了转变，

表 VI. 距离离散阈值 $T_c^h = 163.82$处的最小种子振幅区间 $E_0^{\rm lo} < E_0^c \le E_0^{\rm hi}(\tau = 1)$。 $U_{\max}^{\rm conv}$是达到的对流态的最大速度。

ΔT	T	T/T_c^h	E_0^c	$U_{\max}^{\rm conv}$
4.1	159.73	0.975	$(3.461, 3.492] \times 10^{-5}$	2.97
14.1	149.73	0.914	$(1.15, 1.33] \times 10^{-4}$	2.69
24.1	139.73	0.853	$(2.37, 2.74] \times 10^{-4}$	2.39
34.1	129.73	0.792	$(4.22, 4.87] \times 10^{-4}$	2.06
44.1	119.73	0.731	$(6。49,\ 7.50] \times 10^{-4}$	1.70
46.6	117.23	0.716	$(8.06, 8.35] \times 10^{-4}$	1.61
49.1	114.73	0.700	$(9.31, 9.65] \times 10^{-4}$	1.50
51.6	112.23	0.685	$(1.075, 1.114] \times 10^{-3}$	1.40
54.1	109.73	0.670	$(1.00, 1.78] \times 10^{-3}$	1.34

$U_{\max} \ge 1$，与对流分支上的状态相同[36]，，且其动能已达到平台，$K(t_{\rm end}) \ge 0.97\,K(0.75\,t_{\rm end})$。所有其他轨迹均衰减，$U_{\max}(t_{\rm end}) < 0.5$ 并持续减小。到达的对流态具有 $U_{\max} \ge 1.34$ （表 VI），远高于阈值，因此分类不依赖于阈值的精确取值。过渡最优解无论收敛得多好，都能证明 $E_0 \ge E_0^c$ 。只有当衰减最优解的优化达到 $\|g_T\|/\|g\| \le 10^{-2}$ 时，才将其视为下界。搜索采用此容差，迭代次数最多为 12 次；对于 $\Delta T \ge 46.6$，迭代次数增加到 30 次，并采用 10^{-3}，因为大振幅下的优化更困难。轨迹在 $\Delta T = 4.1$ 处积分至 $t = 40$，取值为 46.6–49.1；在 $\Delta T = 51.6$ 处积分至 $t = 60$，取值为 54.1。

远离括号区域时，分类结果明确。衰减轨迹大多会到达$K(t_{\rm end}) \lesssim 10^{-11}$，而发生转变的轨迹则会饱和于对流态[图 8(b)]。接近临界振幅时，轨迹会趋近于一个中等振幅状态，并在其附近停留若干时间单位，之后要么衰减，要么离开并趋向对流。在 $T = 149.73$ 最小的过渡最优解保持在 $U_{\max} \simeq 0.75$直到 $t \approx 3$ 并且仅在 $U_{\max} = 1$ 时才穿过 $t = 5.1$。

结果见表 VI 和图 8。随着层远离阈值，最小种子单调增长。在 $\Delta T = 14.1$ 至 44.1 之间，临界振幅增加约 5.6 倍，大致按 $E_0^c \propto \Delta T^{1.5}$ 增长；在$\Delta T = 44.1$ 至 51.6 之间又增加了 1.6 倍。在 E_0^c 处，式 (36) 中的均方根扰动从 $\Delta T = 4.1$ 处注入电荷的 0.53% 增至 $\Delta T = 44.1$ 处的 2.5% 和 $\Delta T = 51.6$处的 3.0%。与此同时，所达到的对流态逐渐减弱，$U_{\max}^{\rm conv}$ 从 3.0 降至 1.3，其动能则从 1.10 降至 0.32（表 VI）。

最小种子在分辨率方面已收敛到二分法的精度。在每个方向上分辨率减半的网格（31×50 每个卷胞的网格单元）上，区间端点与原结果相同，或高出一个二分步骤 [图 8(a)]。

a. 亚临界范围的下端。 随着 T 减小，转变轨迹所达到的对流态持续减弱（表VI），这表明对流分支在非线性阈值处终止 $T_{\rm NL}$，即在鞍结分岔处与边缘态分支合并 [图 1(a)]。在搜索的最低值 $T/T_c^h = 0.670\,(\Delta T = 54.1)$ 处仍存在对流态，其中 $U_{\max} = 1.34$已接近漂移速度尺度，并且 $K = 0.32$。因此，该分支的终点就在其下方，

$$T_{\rm NL} \approx 0.67\,T_c. \tag{41}$$

直到分支终点，最小种子都是注入电荷百分之几的扰动。在 $T_{\rm NL}$ 以下，转变变得不可能，因为对流分支本身不再存在。

该数值与对流分支的直接数值模拟结果一致。在宽度为 0。614 的网格单元中，采用应力自由、零通量侧向边界，这等价于我们周期层的 $\mathcal{P}$-偶对称子空间（第 III D节），Traoré 和 Pérez [37] 以及 Wu 等人[36,38] 追踪

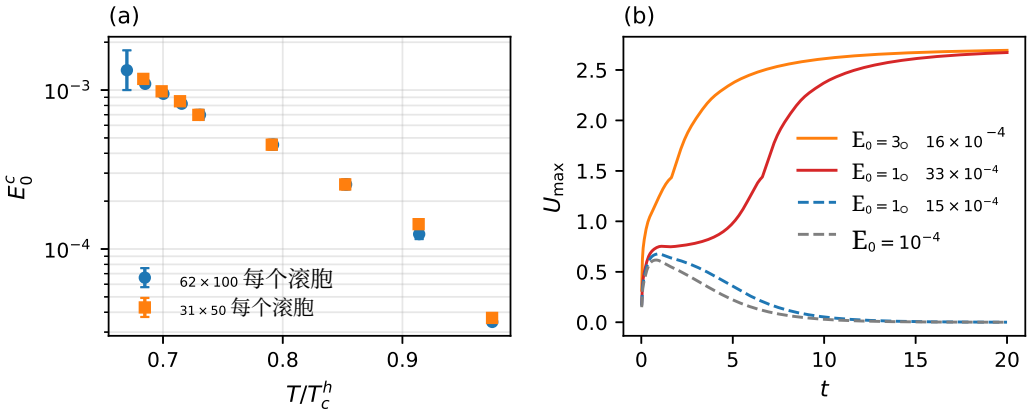

图 8. 最小种子。(a) 在生产网格和分辨率减半的网格（每个滚胞 31×50 个网格单元）上，临界振幅 E_0^c 随 T/T_c^h 的变化；两种网格与各自离散阈值的距离相同。(b) 搜索振幅取四个值时，最优轨迹在 $T = 149.73$ （$\Delta T = 14.1$）处的最大速度：其中两个振幅分别位于 E_0^c 两侧，另外两个则各在一侧进一步取值。实线表示转变轨迹，虚线表示未转变轨迹。

对流态，同时减小 T，并发现当 $C = M = 10$时，运动在$T_f = 108.2$处停止，此时他们使用的是最精细网格。这对应于 $T_f/T_c = 0.66$，而我们的计算结果为 $T_{\rm NL} < 109.73\,(0.670\,T_c^h)$。两种测定都确定了同一分支的终点：他们通过延拓确定，而我们则依据最优扰动的演化确定。Wu等人[36] 还指出， T_f 对电荷方程的数值扩散非常敏感。与他们的模拟一样，对流态在整个分支上直到终点，其 $U_{\max}$ 仍高于漂移速度尺度。Atten 和 Lacroix 的非线性稳定性分析[39], 假设 $M \to \infty$ 且速度场为模态速度场，得到较高的数值 125 和 116 ，分别对应一个和两个模态。差异源于该分析中假设的自相似速度场[36]。

b. 边缘态。对于 T 接近阈值的取值（$\Delta T = 4.1$ 见表VI），通过积分至0。9%，将区间缩小至，由此揭示了轨迹在接近最小种子 $t = 40$时的行为 [图9(a)]。所有扰动最初都会在 $t \approx 1$内松弛至一个振幅中等的共同状态， $U_{\max} \approx 0.4$并在其附近停留。高于临界振幅的扰动最终会离开该状态，转向对流态；低于临界振幅的扰动则会衰减。转变轨迹到达 $U_{\max} = 1$ 所需的时间会随着振幅趋近临界振幅而按对数发散 [图9(b)],

$$
\begin{aligned}
t_{\rm cross} &\simeq b - \frac{1}{\lambda}\ln(E_0 - E_0^c)\,, \\
\lambda &= 0.211, \quad E_0^c = 3.477\times10^{-5},
\end{aligned}
\tag{42}
$$

其中 λ 是第 VE 节中独立测得的增长率。取此值时，5% 范围内的 E_0^c 三条轨迹的拟合残差为 0.02 时间单位，而三参数自由拟合得到 $\lambda = 0.214$。

这种行为表明存在一个边缘态[19,20], , 即一个只有一个不稳定方向的鞍点，其稳定流形将静水态和对流态的吸引域分隔开来。最小种子是该流形上振幅最小的点 [图 1(b)]。振幅为 E_0 的扰动起初距该流形 $\delta \propto E_0 - E_0^c$ 。它的稳定分量迅速衰减，因此沿着流形被带至边缘态附近，从而形成平台。在那里，它沿不稳定方向的分量以 $\delta\, e^{\lambda t}$的速率增长，因此经过 $\lambda^{-1}\ln\left(\delta^{-1}\right)$[40] （第 6 章）后离开。这就是式（42）中的对数项，因此其斜率测量的是不稳定特征值。到达平台所需的时间与 δ 无关，并计入 b中。

边缘态可以直接作为离散方程的稳态解进行计算。从 $T = 159.73$处夹逼轨迹的平台值出发，牛顿法

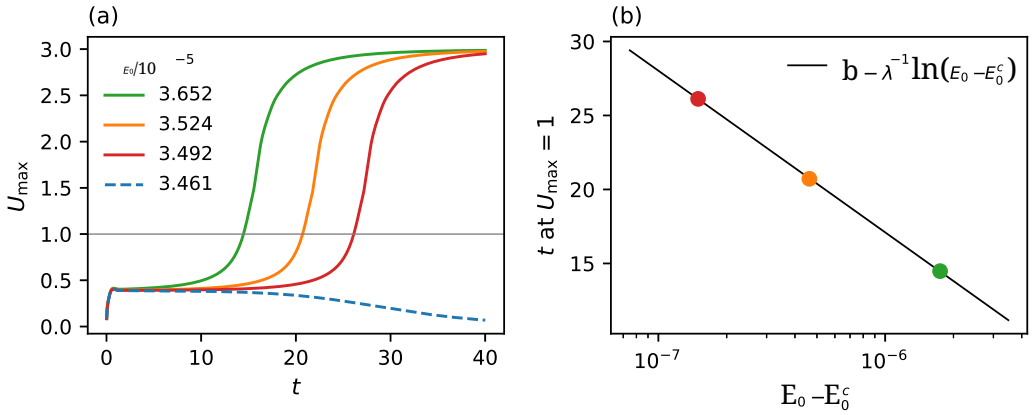

图9. 在 $T = 159.73$ ($\Delta T = 4.1$) 处趋近最小种子。(a) 括号中的最大非转捩振幅（虚线）和用于 (b) 的三个转捩振幅（实线）对应的最优轨迹的最大速度。(b) $U_{\max} = 1$ 随 $E_0 - E_0^c$ 变化的时间，遵循方程 (42) 的规律，$\lambda = 0.211$。颜色与 (a) 中对应。

收敛到一个稳态，其中 $U_{\max} = 0.389$ 和 $K = 0.0268$与平台值的差异均在 0.4% 以内。其线性化具有一个不稳定特征值 $\sigma_1 = 0.2108$，该值与从轨迹中测得的逃逸率 $\lambda = 0.211$ 一致；此外，还有一个与水平平移相关的零特征值，以及其余的稳定特征值（$\mathrm{Re}\,\sigma \le -2.9$）。通过伪弧长延拓，在限制为镜面对称场的条件下，沿 T 跟踪边缘态，直至 $T/T_c^h = 0.76$（图 10）。在阈值附近 $U_{\max}^2 \propto T_c^h - T$，将其外推至零得到$T = 163.78$，而第二节 C 中计算出的线性值为 $T_c^h = 163.82$。边缘态构成了从静水态在线性阈值处离开的亚临界叉式分岔的不稳定分支。图 10(b) 展示了当 T 偏离线性阈值时边缘态的演化。靠近该阈值时，边缘态具有临界模态的结构。进一步远离阈值后，滚胞增强，电荷扰动集中为亏损，这与有限振幅最优扰动具有相同的符号不对称性。不稳定特征值增大至 $\sigma_1 \simeq 1.1$（接近 $T/T_c^h = 0.78$），随后减小；当其趋近鞍结、到达不稳定分支末端时，必然会降为零。当 $U_{\max}$ 超过漂移速度尺度、接近 $T/T_c^h = 0.82$ 时，每个滚胞内部都会形成一个电荷空洞，其中由 $\boldsymbol{u} + \boldsymbol{E}$携带的电荷沿闭合轨道运动并衰减至零。该空洞从滚胞中心向下游偏移，位于$\boldsymbol{u} + \boldsymbol{E} = \boldsymbol{0}$的点附近。随后，谱中出现一簇与该空洞相关的弱阻尼模态。延拓在 $T/T_c^h = 0.76$处停止，因为采用稳定化离散时，牛顿法不再能够可靠收敛；这种离散化会在空洞内部产生微小的负电荷欠冲。

c. 分岔图。图11 汇总了对流态和边缘态。低于$T/T_c^h = 0.76$时，延拓会停止；此时仍可根据临界振幅附近的轨迹估算边缘态，只要二分括区足够窄（不超过4%），使轨迹能在其附近停留。从最小转变轨迹的平台上读出的最大速度为 $U_{\max} = 1.19$–1。22，介于 $T/T_c^h = 0.716$和0。685之间，延续了计算得到的分支；该分支在 $U_{\max} = 1.11$处达到 $T/T_c^h = 0.760$。在相同范围内，对流态从 $U_{\max} = 1.61$ 减弱至1。40，两条分支逐渐靠近，并在鞍结处合并 T_{NL}，该处接近 Wu等人[36]提出的有限振幅判据 $U_{\max}$ 。在分支末端附近，对流态和边缘态的速度都高于漂移速度尺度。

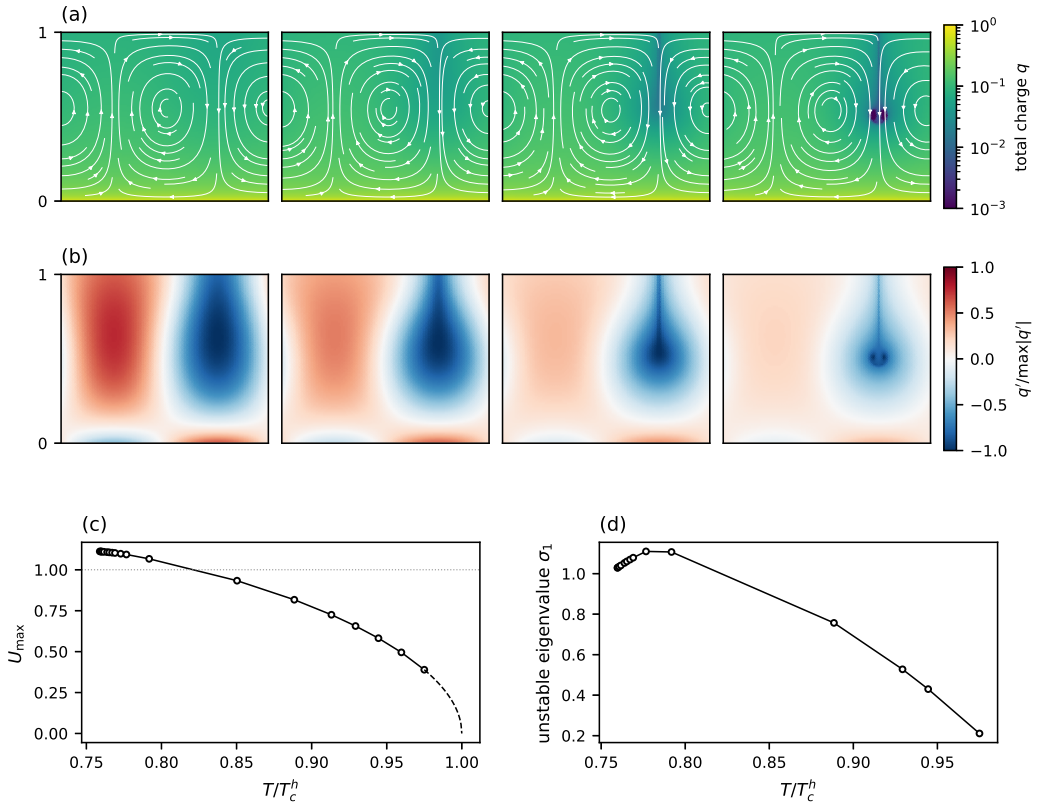

图 10. 计算得到的边缘态（生产网格）。(a) 总电荷 $q_b + q'$（对数刻度）和流线。(b) 电荷扰动 q'，按其最大值归一化。从左到右，$T/T_c^h = 0.975$、0.888、0.792 和 0.760，$U_{\max} = 0.39$、0.82、1.07 和 1.11，以及最大值 $|q'| = 0.016$, 0.044 0.081 0.12 $U_{\max} \propto T_c^h - T^{1/2}$，和 。(c) 分支上的最大速度，以及阈值附近的定律（虚线）。点线表示漂移速度尺度 $U_{\max} = 1$。(d) 边缘态的不稳定特征值。

E. 最优轨迹的模态结构

轨迹可以分解为相同 T处线性化动力学的特征模态。离散扰动问题是微分-代数系统 $\mathsf{M}\,\dot{\boldsymbol{z}}' + \mathcal{S}'(\boldsymbol{z}') = 0$(附录B)，其中M 包含速度和电荷的时间导数项（包括 SUPG项），并且在 p' 和 ϕ'处是奇异的。令J 为$\mathcal{S}'$ 在 $\boldsymbol{z}' = 0$处的雅可比矩阵，则时间模态和伴随模态满足

$$-\mathsf{J}\hat{\boldsymbol{z}}_j = \sigma_j \mathsf{M}\hat{\boldsymbol{z}}_j, \qquad -\mathsf{J}^{\mathsf{T}}\hat{\boldsymbol{z}}_j^{\dagger} = \sigma_j \mathsf{M}^{\mathsf{T}}\hat{\boldsymbol{z}}_j^{\dagger}, \tag{43}$$

并且满足双正交关系，$\hat{\boldsymbol{z}}_i^{\dagger\mathsf{T}}\,\mathsf{M}\hat{\boldsymbol{z}}_j = 0$ 对于 $\sigma_i \neq \sigma_j$。由于算子是非正规的，直接模态远非正交，因此用直接模态展开状态，但利用伴随模态的正交性计算系数，

$$\boldsymbol{z}'(t) = \sum_j a_j(t)\hat{\boldsymbol{z}}_j + \boldsymbol{r}(t), \qquad a_j = \frac{\hat{\boldsymbol{z}}_j^{\dagger\mathsf{T}}\mathsf{M}\boldsymbol{z}'}{\hat{\boldsymbol{z}}_j^{\dagger\mathsf{T}}\mathsf{M}\hat{\boldsymbol{z}}_j}, \tag{44}$$

对于每个保留的模态，无论谱其余部分的内容如何，该式都是精确的，并给出 $a_j(t) = a_j(0)e^{\sigma_j t}$ 在线性区间内[41,42]。通过对方程（43）应用移位反演 Arnoldi 方法，计算 $\mathrm{Re}\,\sigma$ 最大的四十个模态，其中 J 和 M 由时间步进器的残差组装而成

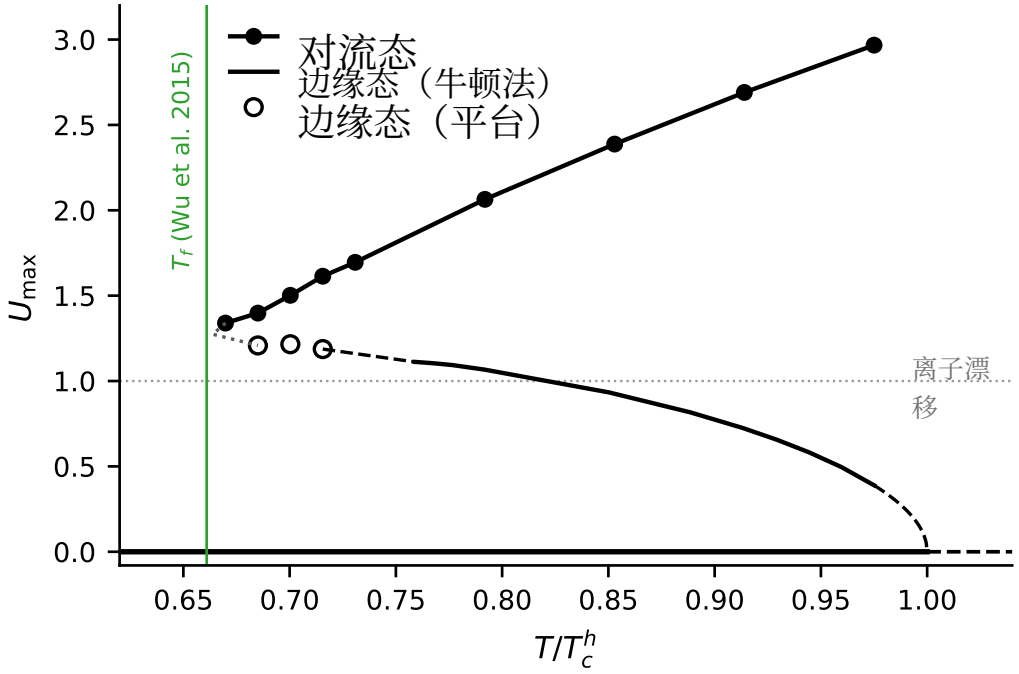

图 11. 在生产网格上计算得到的分岔图，显示对流态（实心符号）的最大速度，以及通过牛顿法和伪弧长延拓计算至 $T/T_c^h = 0.76$（实线）的边缘态最大速度；边缘态最大速度也根据将临界振幅夹定在 4% 范围内的轨迹平台估算得出（空心符号）。虚线： T_c^h附近的叉形定律，以及计算所得与估算所得边缘态之间的插值。点线：示意性的鞍结。

。在周期层中，它们成对简并（彼此为平移关系），并且每一对中各分量的动能 K_g 与水平相位无关。在 $T = 159.73$ 最不稳定的一对中，模态是 $n = 1$ 滚胞， $\sigma_1 = -0.1166$，这与第 IV B节中的斜率 $\mathrm{d}\sigma_{\mathrm{NM}}/\mathrm{d}T$ 一致。接下来的 $n = 1$ 几对模态呈振荡特性，并受到强烈阻尼， $\sigma = -5.42 \pm 9.08$即 -6.84 ± 14.56i。

a. 线性最优解。图12显示了以线性最优解为初始条件进行直接模拟时，动能随时间的演化（$E_0 = 10^{-8}$， $\tau = 1$）。在 $t = 0$ 时，速度为零，但主导模态对已具有动能 $K_1 = 7.7 \times 10^{-6}$。这部分动能被两个振荡 $n = 1$ 模态对抵消，它们的分量分别具有 1.0×10^{-5} 和 1.5×10^{-5}。

每一对振荡模态， $\sigma = -\gamma \pm \mathrm{i}\omega$，都会对速度贡献一个与$e^{-\gamma t}\cos(\omega t + \varphi)$成正比的项。其动能以 2ω的频率振荡，同时处于按 $e^{-2\gamma t}$衰减的包络内，由此形成了图12中的瓣状结构。阻尼时间 $1/\gamma = 0.18$ 和0.15短于周期 $2\pi/\omega = 0.69$ 和0.43，因此振荡分量会在不到一个周期内衰减。随着它们衰减，抵消效应消失，主导模态显现出来。动能最多仅比主导模态对的动能高4%，这一最大值出现在 $t \simeq 0.65$处，而差值 $K - K_1$ 每隔第一个振荡模态的半个周期 π/ω 就会改变符号。由于各模态并不正交， K 并不是模态能量之和。其中还包含量级为$2\sqrt{K_1 K_{\mathrm{osc}}}$的交叉项，这些交叉项远大于振荡分量自身的能量 K_{osc} 。展开的截断在此不起作用，因为对于 $t > 0.55$ ，残差 $\boldsymbol{r}$ 所携带的动能不到 10^{-4} 。振荡模态是离子输运中的渡越时间模态，将在第六节中详细讨论。

动能上升至其最大值 6.9×10^{-6}，此时为 $t = 0.58$，随后 K趋近于

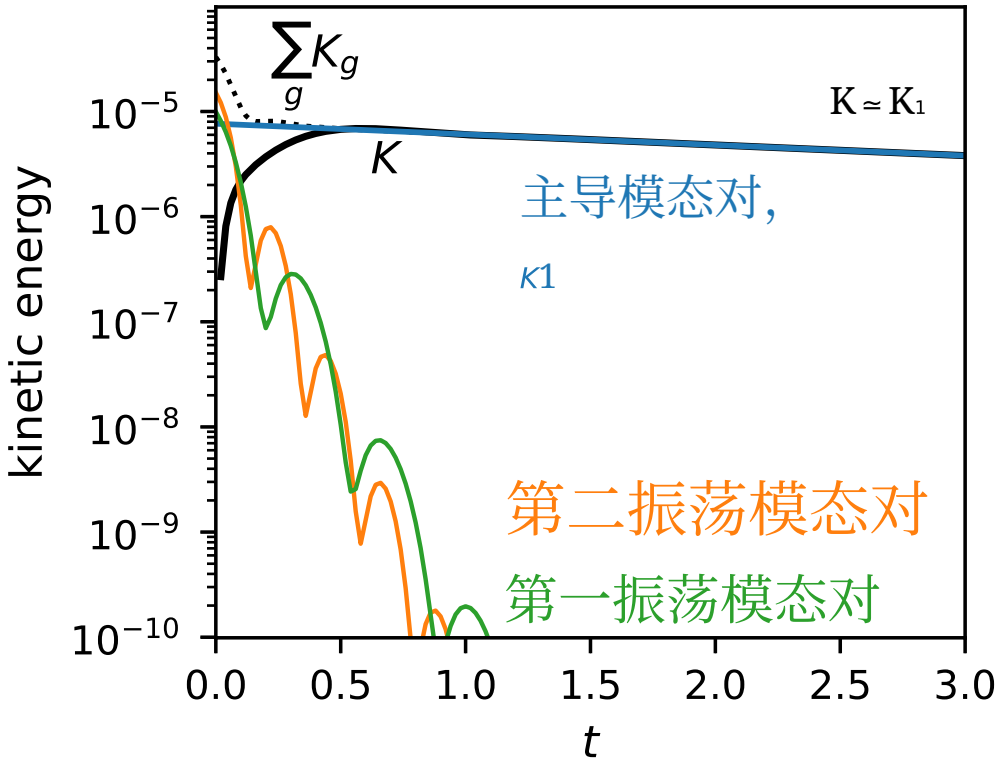

图12. $T = 159.73$ ($E_0 = 10^{-8}$, $\tau = 1$)处的线性最优。对时间特征模态进行分解，显示动能 K、主导 $n = 1$ 模态对分量的能量 K_1、第一和第二振荡 $n = 1$ 模态对分量的能量（$\sigma = -5.42 \pm 9.08$i和 -6.84 ± 14.56i），以及 $\sum_g K_g$；当模态分量相消时，该值超过 K。

K_1 并以 $2\sigma_1$的速率衰减。最优解使单位电荷能量所含的主导模态成分达到最大（$K_1/E_0 = 765$），同时通过叠加非正交快速模态使初始速度为零。这就是非模态增长的机制[11]。

b. 最小种子。图13(a)显示了略高于和略低于临界振幅的最优扰动（$E_0 = 3.492 \times 10^{-5}$ 和 3.461×10^{-5}，相差0.9%），以及第一个扰动的符号反转。直到 $t \approx 0.6$，其演化都重复线性最优的演化过程，其中 K 升至0.027，$U_{\max}$ 升至0.39。随后，在 $t \approx 1$ 至15之间，两条轨迹都停留在平台上，此时 K 几乎没有变化；高于临界振幅时为 $K(10)/K(1) = 1.06$，低于临界振幅时为0.99，而线性衰减对应的数值为0.12。主导 $n = 1$ 模态对对平台能量的贡献精确到3%以内（$K_1/K = 1.03$）。其余展开包括由二次项强迫的$n = 2$ 谐波，以及保留模态之外的残差，其动能占6%。因此，边缘态在几个百分点的误差范围内，是最不稳定线性模态的有限振幅版本，其中非线性项与其线性衰减相平衡。两条轨迹呈指数分离，

$$|K_{\text{above}} - K_{\text{below}}| \propto e^{\lambda t}, \qquad \lambda = 0.211, \tag{45}$$

在 λ 与 0.210 和 0.213 之间的每个时间窗口内 $t = 2$ 和 18 [图 13（b）]。这λ 是边缘态唯一不稳定方向的增长率，即方程（42）中使用的数值。高于临界振幅时，轨迹离开由线性模态张成的空间（在对流态中，残差 $\boldsymbol{r}$ 所携带的动能是流动的七倍，因此展开失去了意义）；而低于该振幅时，轨迹返回线性区间，并以 $2\sigma_1$衰减。

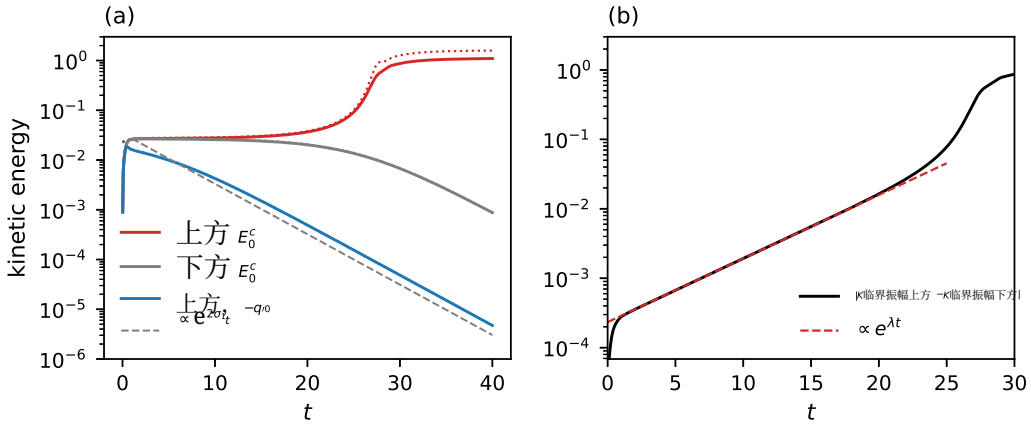

图13. 临界振幅 $T = 159.73$ 下的最优轨迹。(a) 略高于（$E_0 = 3.492 \times 10^{-5}$）和略低于（$E_0 = 3.461 \times 10^{-5}$）临界振幅的最优扰动，以及第一个扰动的符号反转；图中显示动能 K（实线）和主导模态对的能量（点线）。虚线：从 $t = 1$ 开始的线性衰减。(b) 临界振幅上方和下方轨迹的分离，并采用指数拟合 $\propto e^{\lambda t}$, $\lambda = 0.211$。

c. 符号反转。 对于 $\pm q_0'$，展开的线性部分完全相同，且在 $t = 0$ 处的 $K_1 = 2.38 \times 10^{-2}$ 在两种情况下都相同。差异是在初始瞬态期间由非线性项产生的。在 $t = 1$ 处，最优解已将 K_1 提高到2.71×10^{-2}，足以到达边缘态；而其符号反转则将其降低至1.64×10^{-2}，并在没有平台的情况下衰减，最终以线性速率衰减。第 VC 节所述的电荷亏损不对称性因此在第一个时间单位内发挥作用，决定有多少能量到达通向边缘态的模态。最小种子在每单位 E_0 中注入主导模态的能量比线性最优少约 11%（$K_1/E_0 = 682$ 相对于 765），以线性效率换取能够通过非线性获得能量的符号不对称结构。

F. 对流起始的意义

这些结果直接关系到线性阈值与电对流实验起始之间的差异。在 T_c 与 $T_{\mathrm{NL}} \approx 0.67\, T_c$ 之间，静水态会受到电荷扰动的影响而失稳；这些扰动的均方根值约为注入电荷的百分之几，其中效率最高的扰动是集中的电荷亏损。在实验中，这种涨落是可能出现的，例如可能源于离子交换膜中的非均匀注入[18]。因此，有限振幅触发可使对流起始从 T_c 降至约其三分之二，但不会低于对流分支的终点。Lacroix、Atten 和 Hopfinger[4] 报告的实验起始 $T \approx 100$ ($T/T_c \approx 0.6$)略低于此值。电荷扩散会降低稳定性阈值[9]，，而实验中的三维效应或有限尺寸效应也可能是造成剩余差异的原因。

VI. 振荡渡越时间模态

第VE 节中的分解表明，在领先的滚动模态之后，阻尼最弱的$n = 1$ 模态是振荡对，非模态增长也依赖于它们。它们的存在关系到 Atten 和 Moreau 留下的一个未解问题[8]。他们证明了弱注入情况下的稳定性交换。振荡扰动可能存在，但增长率始终为负。对于任意注入，他们无法扩展这一证明，于是转而搜索

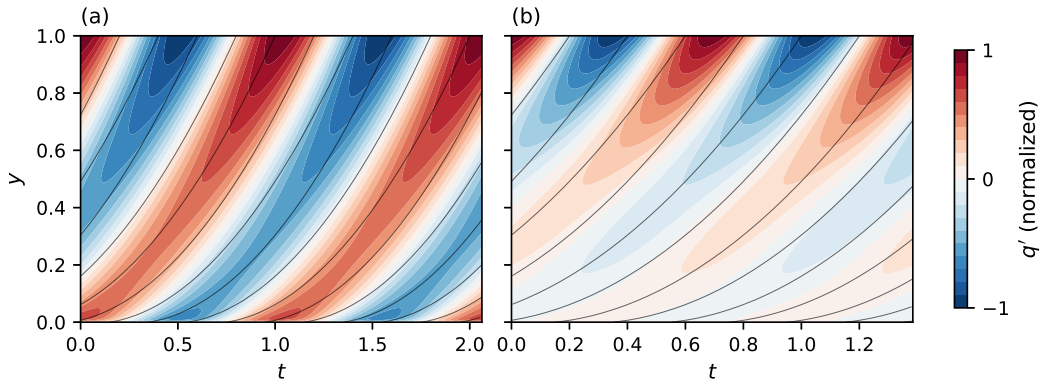

图 14. $(t,\ y)$ 平面中，$C = 10$下阻尼最弱振荡模态的电荷扰动，去除了衰减因子。(a) 水平向均匀模态（$n = 0$，无流动），精确解，$\sigma = -3.01 \pm 6.09\,\mathrm{i}$。(b) 完整问题的第一个振荡 $n = 1$模态（$M = 10$，$T = 159.73$，$k = 2\pi/L$，第VI节的谱代码），$\sigma = -5.36 \pm 9.08\,\mathrm{i}$，位于最大振幅的水平位置。细线：静水态离子的运动轨迹，$t - \int_0^y \mathrm{d}y'/E_b =$常数。

数值求解 $C = 5$ 中性振荡解 $\sigma = \mathrm{i}\beta$ $(0 \le T \le 2000,\ 2 \le k \le 12,0 \le \beta \le 50)$ $\sigma =$，但没有找到，因此得出结论：不稳定性以稳态胞状运动的形式出现。本节将辨识这些振荡模态，解释其起源，并说明它们在 $C = 10$ 下仍然受阻尼。

A. 谱计算

对单个水平傅里叶模态 $(\boldsymbol{u}', p', \phi', q') = (\hat{\boldsymbol{u}}, \hat{p}, \hat{\phi}, \hat{q})(y)\ e^{\mathrm{i}kx+\sigma t}$，计算线性化问题的时间谱，从而将其化简为关于垂直速度、电荷密度和电势的一维广义特征值问题。采用切比雪夫配置法对垂直结构进行离散，网格为 $N = 60$，并使用稠密 QZ 求解器求得完整谱。该代码给出的 $T_c = 164.06$和 $k_c = 5.113$ $(\lambda_c = 1.229)$，与 Atten 和 Moreau [8]的 $T_c \simeq 164.1$ 和 $k_c = 5.113$，以及 Pérez 等人 [24]的 $T_c = 164.09$ 相符。在 $T = 159.73$ 和 $k = 2\pi/L$ 下，该代码给出 $\sigma_1 = -0.124$ 和振荡对 -5.36 ± 9.08i及 -6.72 ± 14.49i。频率与第五节 E 中二维离散算子的结果相差不超过 0.5%。 σ_1的差异反映了生产网格的阈值 $T_c^h = 163.82$，而收敛问题的阈值为 164.06。将 N 增至 90 后，这些特征值的变化小于 10^{-3}。由于问题在 x 中可分离，计算完整谱约需 10^{-2}秒，比对二维算子使用移位反演 Arnoldi 方法快几个数量级，因此能够系统地探索 (k, T, M) 参数空间。

B. 振荡模态的物理起源

振荡模态的物理起源是电场对电荷的输运。将动量方程，即式（11），除以 M^2，可以看到，当 $M \to \infty$时，惯性消失。在此极限下，振荡对依然存在，其频率趋近于 9。59 和 15。12 （相比之下，9。08 和 14。49 对于 $M = 10$）。水平向均匀模态（$n = 0$）不产生流动，但同样具有振荡性，其频率与 M 无关。对于这些模态，可以沿离子路径精确求解线性化问题（附录 C），其增长率为下式的根：

$$P(\sigma) = C^2 e^{-\sigma t_{\mathrm{tr}}}, \tag{46}$$

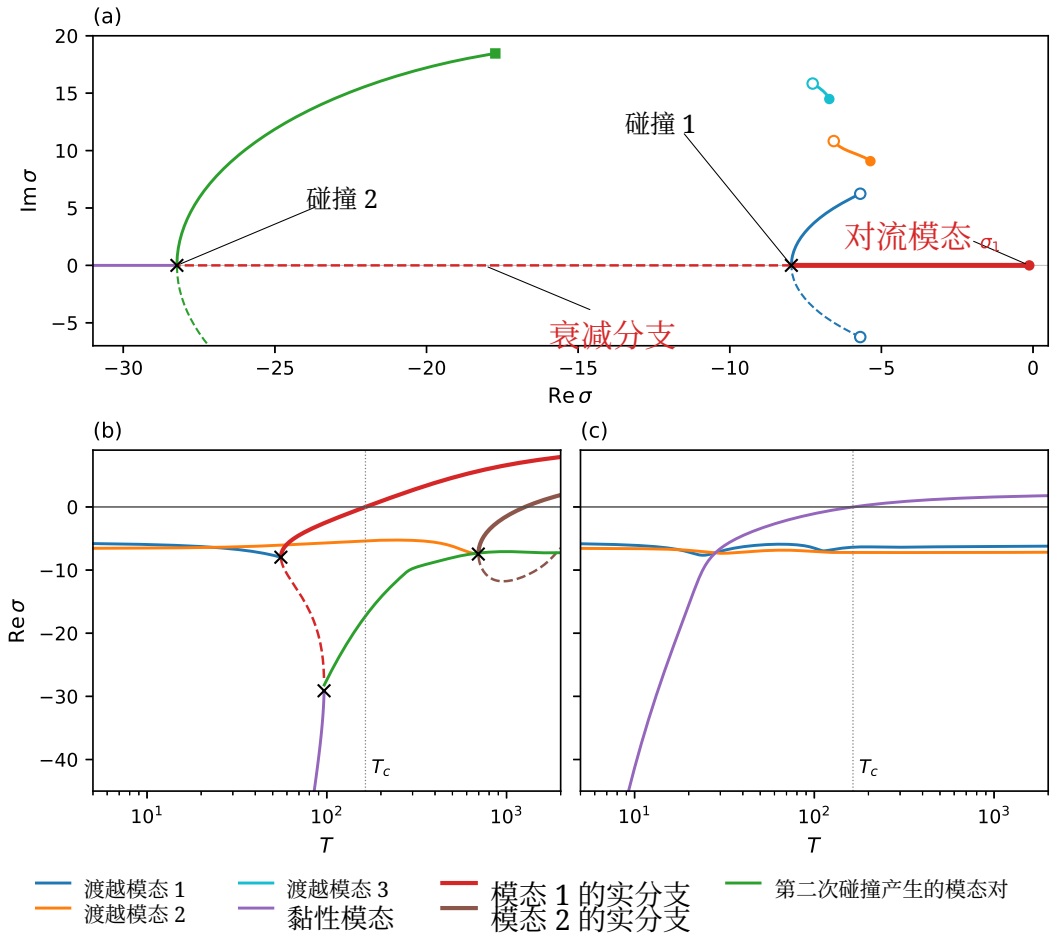

图 15。在 T 中对第一个渡越时间模态和最慢黏性模态 $C = 10$、$k = 2\pi/L$ $N = 60$ $M = 10$ T （切比雪夫，）进行延拓。(a) 当 T 从 1（空心圆）增加到 159.73（实心符号）时，$M = 10$ 在复平面中的特征值。第二和第三个渡越模态变为振荡对 $-5.36 \pm 9.08\,\mathrm{i}$ 和 $-6.72 \pm 14.49\mathrm{i}$，其共轭模态未显示。虚线：第一个模态的共轭模态和衰减实分支。第一次碰撞（$T = 55.6$）后，两个实分支分别为对流模态（粗线）和一个衰减分支；在第二次碰撞（$T = 96.6$）处，该分支与最慢黏性模态合并为一个强阻尼模态对（$T = 159.73$ 处的方块）。(b)、(c) $M = 3$ 和 × 下，特征值实部随 T 的变化。$T_c = 164.06$：两个特征值相遇的点。一对模态到达实轴后，其两个实分支以新的颜色绘制；上升的分支用实线表示，下降的分支用虚线表示。点线：$T_c = 164.06$。

其中，P 是一个三次多项式，而 $t_{\mathrm{tr}} = \int_0^1 \mathrm{d}y/E_b = 1.248$ 是离子穿过该层的渡越时间。这些根构成一个无限序列的阻尼模态，其频率间隔约为 $2\pi/t_{\mathrm{tr}}$。第一个为 -3.014 ± 6.092 i。谱代码对这些模态的计算相对误差低于 3×10^{-5} （表 VII）。每个模态都是一个电荷波，以漂移速度从注入器传播到收集极；一次渡越的延迟决定了其频率 [图 14(a)]。注入器处产生的场扰动沿离子路径传播；一个渡越时间后，它在收集极离开该层。此时，固定的外加电压要求电流作出补偿性变化，从而在注入器处激发新的扰动。振荡 $n = 1$ 模态的电荷波沿着相同的离子路径传播 [图 14(b)]。

C. 从渡越模态到对流模态 **ode**

在 T_c 以下，基态处于静止状态，速度仅作为扰动模态的一个分量出现。在一个模态中，伴随电荷扰动的速度扰动由式（11）中的黏性力与库仑力之间的平衡决定，即 $(M^2/T)\nabla^2\boldsymbol{u}' \sim CM^2q'\boldsymbol{E}$，其量级为以漂移速度为单位的 $TC|q'|$。当 T 远小于 T_c 时，这一速度分量很小，几乎不会改变电荷输运，因此这些模态接近于 $n=1$ 电学问题中的渡越模态，其中速度扰动被抑制。对于 $k=2\pi/L$，它们分别为 -5.67 ± 6.27i、-6.58 ± 10.85 i 和 -7.27 ± 15.85i。它们的频率与 $n=0$ 模态接近，但阻尼更强，因为场扰动在距离 $1/k$ 内受到屏蔽。在 $M=10$ 和 $T=10$ 处，前两对模态 -5.94 ± 5.92i 和 -6.52 ± 10.65i 与它们相差 5% 和 2%，且偏差随 T 线性增长。随着 T 增大而 M 保持不变——这正是实验中提高电压时所遵循的路径——电荷扰动与速度扰动之间的耦合变得重要。

图15(a)追踪了 $T=1$ 至 $T=159.73$ 的模态，对应于 $M=10$ 和 $k=2\pi/L$。第二和第三个模态（图中的橙色和青色）变为振荡对-5.36 ± 9.08i 和 -6.72 ± 14.49i，其频率相较于电学问题分别降低了 16% 和 9%。第一个模态的阻尼增强，频率也降低。在 $T=55.6$ 处，其虚部变为零，这一对共轭复特征值在实轴上相遇（$\sigma\simeq-7.97$），并分裂为两个实模态。其中一个变为对流模态，$\sigma_1=-0.124$在 $T=159.73$处。另一个向左移动，并在$T=96.6$ （$\sigma\simeq-28.2$）处与流动中阻尼最弱的黏性模态相遇。在没有耦合时，该模态是刚性壁面之间流动扰动衰减最慢的黏性模态。其增长率为 $\sigma=-(M^2/T)\mu_1$，其中 μ_1 是 $(\mathrm{D}^2-k^2)^2\psi=-\mu(\mathrm{D}^2-k^2)\psi$ 的最小特征值，边界条件为 $\psi=\mathrm{D}\psi=0$ 在 $y=0$、1 处，以及 $\mathrm{D}=\mathrm{d}/\mathrm{d}y$。它仅取决于 k，且对于$k=2\pi/L$，$\mu_1=47.55$。因此，黏性模态在 T 较小时受到强烈阻尼，并随着 T 增大而趋近渡越模态。第二次碰撞后，二者形成一个受到强烈阻尼的振荡对，-17.73 ± 18.46i 在 $T=159.73$处。

图15(b)显示了相同模态的实部随 T变化的情况，直至 $T=2000$。第一对模态的碰撞，以及衰减分支与黏性模态的碰撞，分别对应左侧和中间的十字。第二对模态在更高的 T下也表现出相同的行为。它的两个特征值在 $T=698$ 处于实轴上相遇（$\sigma\simeq-7.46$，右侧十字），由此形成的实分支中有一个在 $T=1267=7.7\,T_c$处变得不稳定。第一对模态的碰撞在 $M=30$ 时移至 $T=61.8$，在无惯性极限下移至62.6；而在 $M=5$时则降至 $T=40.2$（$\sigma\simeq-10.5$）。当 M 更小时，变化顺序则有所不同。在 $M=3$ [图15(c)]中，第一对渡越模态在 T_c 之前始终保持振荡（此处为-6.37 ± 7.28），而变得不稳定的模态是最慢黏性模态。随着 T增大，库仑耦合使该模态受到的阻尼越来越弱（在 $T=20$时为$\sigma=-15.5$，而无耦合时为 $-(M^2/T)\mu_1=-21.4$），直至其穿过零点。由于 M 在中性稳定问题中不再出现，因此 T_c 处的临界模态在所有情况下都相同。惯性所影响的是该模态由稳定谱的哪个分支到达。

分支在 $M^*\simeq4.8$ 处发生变化。这可以通过比较两个分支的阻尼率来理解。最慢的黏性模态以 $(M^2/T)\mu_1$ 的速率衰减，其中 $M^2/T=\nu/(KV_0)$ 是漂移时间与黏性时间之比，即 Atten 和 Moreau 的参数 $R=KV_0/\nu$ 的倒数[8]。在 T_c 处，对于 $M=3$，该速率为 2.6；对于 $M=4.75$，为 6.5；对于 $M=5$，为 7.2；对于 $M=10$，为 29。第一个渡越模态以约 6–8 的速率衰减，该速率由离子的渡越决定。库仑反馈会使两个模态中阻尼较弱的那个失稳。对于较小的 M，流动是慢变量，而电荷会适应流动，因此不稳定性从黏性模态中发展出来。对于较大的 M，流动会快速适应，而慢变量是电荷输运，因此不稳定性从渡越模态中发展出来。瑞利–贝纳德对流中也会发生同样的情况，其中普朗特数决定临界模态是延续最慢的黏性模态还是最慢的热模态，尽管在那里两个模态都是真特征值，并不一定会发生碰撞[43]。

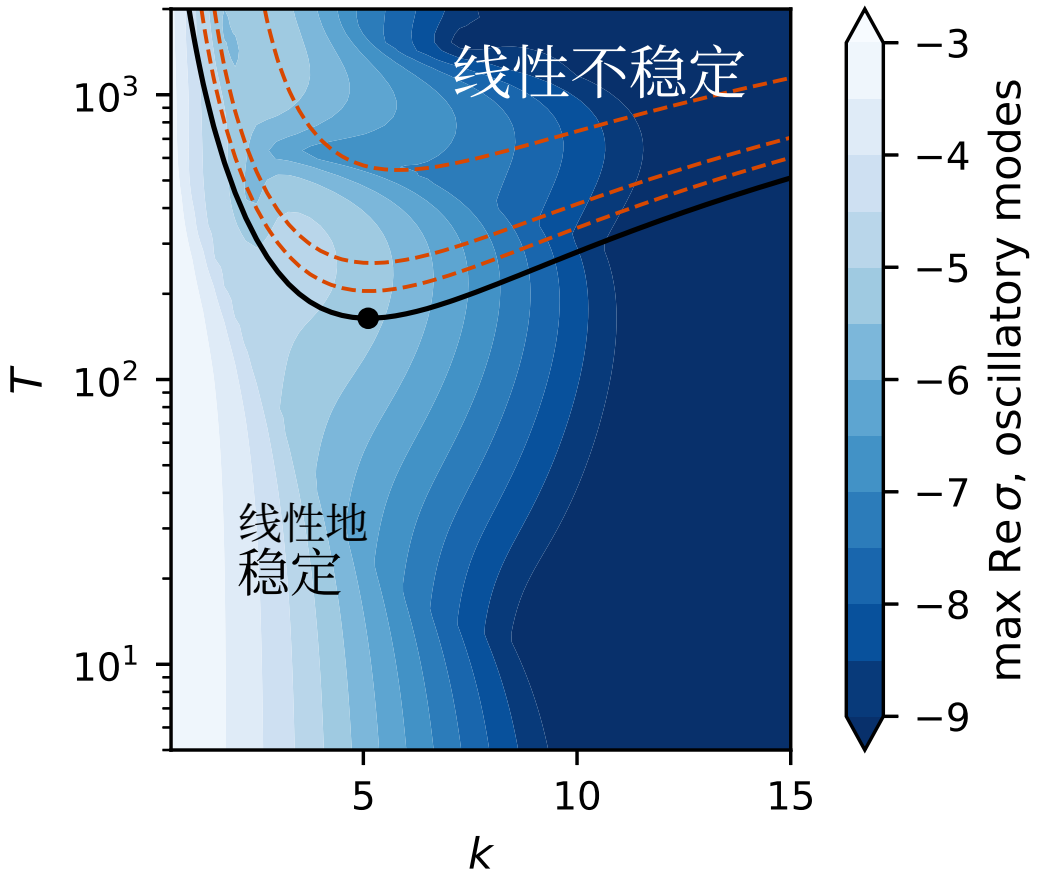

图16.（k，T）平面中的最小受阻尼振荡特征值，$C = 10$, $M = 10$（切比雪夫，$N = 60$）。颜色表示其实部，该实部处处为负。未包含稳态模态的实特征值。黑线：稳态模态的中性曲线，曲线上方的基态通过此实特征值而线性不稳定。虚线：其增长率，$\sigma = 1$、2和5。圆点：（k_c，T_c）。

D. 稳定性交换

第五节 C 的延拓表明，在 $k = 2\pi/L$ 处，发生不稳定的模态对于所考虑的 M 的所有取值都是真模态。为检查是否有任何振荡模态变得不稳定，在由 59 个波数组成的网格 $0.5 \le k \le 15$ 以及 $5 \le T \le 2000$ 的 90 个取值上计算了谱，其中 $M = 1$、3、10、30、100 和无惯性极限；约 3×10^4 个谱即可在几分钟内完成计算。没有振荡模态变得不稳定。在整个网格范围内，对于每个 M，阻尼最弱的模态均满足 Re $\sigma \le -3.0$。它总是在较小的波数处出现，即 $k \le 0.75$，此时各模态趋近于水平向均匀的穿越模态；而在 k_c 附近，振荡模态保持在 Re$\,\sigma = -7.2$ 和 -4.5 之间（图16）。因此，对于 $C = 10$ 以及 Atten 和 Moreau 所考察的范围，不稳定性是通过一个实特征值发生的，而第五节 C 的延拓解释了其中的原因。每个稳态模态要么是由流动反馈（$M > M^*$）变为实模态的穿越时间模态对，要么是被流动反馈 destabilized 的最慢黏性模态（$M < M^*$），其余模态对则保持强阻尼。这是针对一种注入强度得到的数值结果，并不能证明稳定性交换。

VII. 结论

我们针对两块无限平行板之间由单极性注入驱动的电对流，建立并验证了一个非线性非模态优化框架，并用一个临界波长的周期性区域对其进行建模。我们采用基于扰动变量的整体有限元离散，并自动推导出离散伴随。将离散问题写成扰动态与基态残差之差，可使零扰动成为精确的离散解；泰勒测试证实，在线性区间和非线性区间中，梯度均为精确值。初始电荷扰动受其能量约束，而目标泛函是在给定时间范围处的动能。

在小振幅、长时间范围极限下，最优响应的渐近增长率再现了线性阈值。渐近增长率在 T_c^{NM} =163。827处为零，这与相同离散化得到的离散模态阈值相符，误差在0。003%以内。模态阈值以二阶精度收敛至164。06，与已发表数值的差异在0。02% 以内[8,24]。

低于线性阈值时，初始扰动的振幅达到 $E_0 \gtrsim 10^{-6}$ 时，非线性效应对最优扰动的影响开始变得明显；当振幅为 $E_0 \sim 10^{-4}$时，这种影响则十分强烈：在最长时间范围内，最优增益最多可提高四倍，且最优初始电荷在结构上不同于线性情形。有限振幅最优解仍保持镜像对称，但在符号上变得高度不对称，集中表现为带有水平向均匀分量和二次谐波的电荷亏损。这源于依赖于振幅的库仑弛豫率 $C(2q_b + q')$。

最小种子随距阈值的距离单调增大：在 $T/T_c = 0.975$ 时为 $E_0^c = 3.5 \times 10^{-5}$，在 $T/T_c = 0.73$ 时增至 (6.5–7.5) $\times 10^{-4}$，并在 $T/T_c = 0.69$时达到 1.1×10^{-3}；也就是说，电荷扰动均方根为注入电荷的 0.5–3%，其分辨率收敛精度达到区间夹逼的精度。随着 T减小，所达到的对流态逐渐减弱，而对流分支在接近 $T_{\mathrm{NL}} \approx 0.67\,T_c$处结束，并在那里与边缘态分支相交。该分支终点与通过在直接数值模拟中对对流态进行延拓而得到的有限振幅判据一致[36]。

将轨迹分解到直接与伴随时间特征模态上，可以解释这些动力学行为。线性瞬态增长揭示了最不稳定滚动模态，而该模态最初被快速振荡模态抵消。在临界振幅附近，轨迹会在一个边缘态附近滞留；该边缘态是这一模态的有限振幅版本，并具有一个增长率为 $\lambda = 0.21$ 的单一不稳定方向。转变所需的时间会按 $\lambda^{-1} \ln(E_0 - E_0^c)^{-1}$ 发散，而扰动的符号在第一个时间单位内就决定了是否会到达边缘态。因此，小幅电荷涨落引发的有限振幅触发会将电对流的起始降低至线性阈值的约三分之二，从而解释了线性阈值与实验起始之间的大部分差距。

参与这种增长的快速振荡模态是离子漂移的渡越时间模态。对于水平方向均匀扰动，它们是精确色散关系的根，$P(\sigma) = C^2 e^{-\sigma t_{\mathrm{tr}}}$，其频率间隔约为 $2\pi/t_{\mathrm{tr}}$。随着 T 增大并趋近于 T_c，电荷扰动与速度扰动之间的耦合增强，其中第一个模态在 $M = 10$ 时成为稳态对流模态，而其他模态仍保持振荡并受到强阻尼。对 $C = 10$、 $T \le 2000$ 和 $0.5 \le k \le 15$ 的谱进行扫描后，没有发现不稳定振荡模态；这支持了 Atten 和 Moreau 针对弱注入证明的、适用于强注入的稳定性交换。稳定谱中的哪一分支通向对流模态取决于迁移率参数。对于 $M > M^* \simeq 4.8$，它是第一个渡越模态；而对于更小的 M，则是最慢黏性模态。分支转换发生在远低于阈值处，即 $T \approx 40$，在阈值附近没有可观测影响。对于液体， M 通常为 10 或更大，属于第一种情况；而气体的 $M \sim 10^{-2}$ 则处于第二种情况的深处。由于这里发现的非模态增长依赖于渡越模态，阈值以下的瞬态动力学在气体中可能有所不同；在气体中，这里被忽略的电荷扩散也变得更加重要。

这项工作的自然延拓方向是纳入电荷扩散，已知这会降低

线性阈值。T 三维效应也可能降低 对流起始。

补充材料

请参阅补充材料，获取本研究使用的 Python 脚本、文档、许可证文件以及复现结果的说明。脚本包括用于非线性电流体动力学方程（第III–V 节和附录A–B）直接-伴随优化的 Firedrake 实现、通过牛顿法和伪弧长延拓计算边缘态的方法，以及用于渡越时间模态及其在 T（第VI 节和附录C）延拓的切比雪夫谱代码。随附的 README 文件中介绍了一项简短检查，可用于复现表I、II 和VII 中的数值。

致谢

作者感谢 MCIN/AEI/10.13039/501100011033/FEDER, UE 提供的经费支持（资助编号：PID2022-138890NB-I00）。在准备本文期间，作者使用 Claude（Anthropic, Opus 5.5）协助编写脚本、分析数据并修正文稿语法。作者对结果进行了审查，并对最终内容承担全部责任。

作者声明

利益冲突

作者没有需要披露的利益冲突。

作者贡献

Pedro A. Vázquez: 概念化（同等贡献）；方法学（主要贡献）；软件（主要贡献）；形式分析（主要贡献）；调查（主要贡献）；可视化（主要贡献）；撰写——初稿（主要贡献）；撰写——审阅与编辑（同等贡献）。**A. T. Pérez:** 概念化（同等贡献）；形式分析（辅助贡献）；经费获取（主要贡献）；撰写——审阅与编辑（同等贡献）。

数据可用性声明

支持本研究结论的数据可根据合理请求向通讯作者索取。用于非线性非模态优化以及渡越时间模态谱计算的脚本作为补充材料提供。

附录 A：伴随方程的推导

本附录推导与第 IIIA 节非线性优化问题相关的连续伴随方程。计算域为 Ω，边界为 $\partial\Omega = \Gamma_i \cup \Gamma_c \cup \Gamma_s$。无量纲直接方程为式（11）–（14），边界条件为式（15）。控制变量是受式（24）约束的初始电荷扰动，目标泛函由式（25）给出，增广拉格朗日量由式（28）给出。通过令

的 $\mathcal{L}$ 关于直接变量 $\boldsymbol{u}$、 p、 q 和 ϕ的任意可容许变分的一阶变分为零，可以得到伴随方程、边界条件和终端条件。该推导扩展了 Kerswell[16] 针对纳维–斯托克斯方程所描述的步骤。为简洁起见，记作

$$\nu = M^2/T, \qquad \beta = CM^2. \tag{A1}$$

拉格朗日量的变分为

$$\delta\mathcal{L} = \mathcal{L}(\boldsymbol{u}+\delta\boldsymbol{u}, p+\delta p, q+\delta q, \phi+\delta\phi) - \mathcal{L}(\boldsymbol{u}, p, q, \phi). \tag{A2}$$

忽略二阶项后，

$$\begin{aligned}
\delta\mathcal{L} = &\int_\Omega \boldsymbol{u}(\tau)\cdot\delta\boldsymbol{u}(\tau)\,\mathrm{d}\Omega - 2\lambda\int_\Omega q_0'\,\delta q_0'\,\mathrm{d}\Omega \\
&- \int_0^\tau\!\!\int_\Omega \boldsymbol{u}^\dagger\cdot\Big[\partial_t\delta\boldsymbol{u} + (\delta\boldsymbol{u}\cdot\nabla)\boldsymbol{u} + (\boldsymbol{u}\cdot\nabla)\delta\boldsymbol{u} + \nabla\delta p \\
&\qquad - \nu\nabla^2\delta\boldsymbol{u} + \beta\,\delta q\,\nabla\phi + \beta q\,\nabla\delta\phi\Big]\,\mathrm{d}\Omega\,\mathrm{d}t \\
&- \int_0^\tau\!\!\int_\Omega p^\dagger\,\nabla\cdot\delta\boldsymbol{u}\,\mathrm{d}\Omega\,\mathrm{d}t - \int_0^\tau\!\!\int_\Omega q^\dagger\Big\{\partial_t\delta q + \nabla\cdot\Big[\delta q\,(\boldsymbol{u}-\nabla\phi) \\
&\qquad + q\,(\delta\boldsymbol{u}-\nabla\delta\phi)\Big]\Big\}\,\mathrm{d}\Omega\,\mathrm{d}t \\
&- \int_0^\tau\!\!\int_\Omega \phi^\dagger\left(\nabla^2\delta\phi + C\,\delta q\right)\,\mathrm{d}\Omega\,\mathrm{d}t.
\end{aligned} \tag{A3}$$

现在对各项积分逐项进行分部积分。在下文中， $\boldsymbol{n}$为外法向单位向量， $\partial_n = \boldsymbol{n}\cdot\nabla$，重复出现的指标表示求和，且 $\left[(\nabla\boldsymbol{u})^{\mathsf{T}}\cdot\boldsymbol{u}^\dagger\right]_j = u_i^\dagger\,\partial_j u_i$。

1. 分部积分

a. 纳维–斯托克斯项。时间导数给出

$$-\int_0^\tau\!\!\int_\Omega \boldsymbol{u}^\dagger\cdot\partial_t\delta\boldsymbol{u}\,\mathrm{d}\Omega\,\mathrm{d}t = -\int_\Omega \boldsymbol{u}^\dagger(\tau)\cdot\delta\boldsymbol{u}(\tau)\,\mathrm{d}\Omega + \int_\Omega \boldsymbol{u}^\dagger(0)\cdot\delta\boldsymbol{u}(0)\,\mathrm{d}\Omega + \int_0^\tau\!\!\int_\Omega \partial_t\boldsymbol{u}^\dagger\cdot\delta\boldsymbol{u}\,\mathrm{d}\Omega\,\mathrm{d}t. \tag{A4}$$

第一个对流项已经是所需的形式，

$$-\int_0^\tau\!\!\int_\Omega \boldsymbol{u}^\dagger\cdot(\delta\boldsymbol{u}\cdot\nabla)\boldsymbol{u}\,\mathrm{d}\Omega\,\mathrm{d}t = -\int_0^\tau\!\!\int_\Omega \delta\boldsymbol{u}\cdot\left[(\nabla\boldsymbol{u})^{\mathsf{T}}\cdot\boldsymbol{u}^\dagger\right]\mathrm{d}\Omega\,\mathrm{d}t, \tag{A5}$$

而第二项使用 $\nabla\cdot\boldsymbol{u} = 0$ 后，变为

$$-\int_0^\tau\!\!\int_\Omega \boldsymbol{u}^\dagger\cdot(\boldsymbol{u}\cdot\nabla)\delta\boldsymbol{u}\,\mathrm{d}\Omega\,\mathrm{d}t = -\int_0^\tau\oint_{\partial\Omega}(\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{n})(\boldsymbol{u}^\dagger\cdot\delta\boldsymbol{u})\,\mathrm{d}S\,\mathrm{d}t + \int_0^\tau\!\!\int_\Omega \delta\boldsymbol{u}\cdot(\boldsymbol{u}\cdot\nabla)\boldsymbol{u}^\dagger\,\mathrm{d}\Omega\,\mathrm{d}t. \tag{A6}$$

对于压力项和连续性项，

$$-\int_0^\tau\!\!\int_\Omega \boldsymbol{u}^\dagger\cdot\nabla\delta p\,\mathrm{d}\Omega\,\mathrm{d}t = -\int_0^\tau\oint_{\partial\Omega}(\boldsymbol{u}^\dagger\cdot\boldsymbol{n})\,\delta p\,\mathrm{d}S\,\mathrm{d}t + \int_0^\tau\!\!\int_\Omega \delta p\,\nabla\cdot\boldsymbol{u}^\dagger\,\mathrm{d}\Omega\,\mathrm{d}t, \tag{A7}$$

$$-\int_0^\tau\!\!\int_\Omega p^\dagger\,\nabla\cdot\delta\boldsymbol{u}\,\mathrm{d}\Omega\,\mathrm{d}t = -\int_0^\tau\oint_{\partial\Omega}p^\dagger\,(\delta\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{n})\,\mathrm{d}S\,\mathrm{d}t + \int_0^\tau\!\!\int_\Omega \delta\boldsymbol{u}\cdot\nabla p^\dagger\,\mathrm{d}\Omega\,\mathrm{d}t, \tag{A8}$$

并且，将格林第二恒等式应用于黏性项可得

$$\begin{aligned}
\nu\int_0^\tau\!\!\int_\Omega \boldsymbol{u}^\dagger\cdot\nabla^2\delta\boldsymbol{u}\,\mathrm{d}\Omega\,\mathrm{d}t = \nu\int_0^\tau\oint_{\partial\Omega}\left(\boldsymbol{u}^\dagger\cdot\partial_n\delta\boldsymbol{u} - \delta\boldsymbol{u}\cdot\partial_n\boldsymbol{u}^\dagger\right)\,\mathrm{d}S\,\mathrm{d}t \\
+ \nu\int_0^\tau\!\!\int_\Omega \delta\boldsymbol{u}\cdot\nabla^2\boldsymbol{u}^\dagger\,\mathrm{d}\Omega\,\mathrm{d}t.
\end{aligned} \tag{A9}$$

b. 动量方程中的力项。该项

$$-\beta \int_0^\tau \int_\Omega (\boldsymbol{u}^\dagger \cdot \nabla \phi)\, \delta q \, \mathrm{d}\Omega \, \mathrm{d}t \tag{A10}$$

已经是所需的形式。另一项通过分部积分处理，

$$-\beta \int_0^\tau \int_\Omega (q\boldsymbol{u}^\dagger) \cdot \nabla \delta\phi \, \mathrm{d}\Omega \, \mathrm{d}t = -\beta \int_0^\tau \oint_{\partial\Omega} q\, (\boldsymbol{u}^\dagger \cdot \boldsymbol{n})\, \delta\phi \, \mathrm{d}S \, \mathrm{d}t + \beta \int_0^\tau \int_\Omega \nabla \cdot (q\boldsymbol{u}^\dagger)\, \delta\phi \, \mathrm{d}\Omega \, \mathrm{d}t, \tag{A11}$$

其中曲面积分使用了散度定理。

c. 电荷方程。 对于时间导数，

$$-\int_0^\tau \int_\Omega q^\dagger \, \partial_t \delta q \, \mathrm{d}\Omega \, \mathrm{d}t = -\int_\Omega q^\dagger(\tau)\, \delta q(\tau) \, \mathrm{d}\Omega + \int_\Omega q^\dagger(0)\, \delta q(0) \, \mathrm{d}\Omega + \int_0^\tau \int_\Omega \partial_t q^\dagger \, \delta q \, \mathrm{d}\Omega \, \mathrm{d}t, \tag{A12}$$

其中 $q^\dagger(\tau)$ 是 $q^\dagger(\boldsymbol{x}, \tau)$ 的简写，等等。对于第一个平流项，

$$\begin{aligned} -\int_0^\tau \int_\Omega q^\dagger \, \nabla \cdot [\delta q\, (\boldsymbol{u} - \nabla\phi)] \, \mathrm{d}\Omega \, \mathrm{d}t = &-\int_0^\tau \oint_{\partial\Omega} q^\dagger \, [(\boldsymbol{u} - \nabla\phi) \cdot \boldsymbol{n}]\, \delta q \, \mathrm{d}S \, \mathrm{d}t \\ &+ \int_0^\tau \int_\Omega (\boldsymbol{u} - \nabla\phi) \cdot \nabla q^\dagger \, \delta q \, \mathrm{d}\Omega \, \mathrm{d}t. \end{aligned} \tag{A13}$$

第二个平流项包含一个关于 $\delta\boldsymbol{u}$ 的贡献，

$$-\int_0^\tau \int_\Omega q^\dagger \, \nabla \cdot (q\, \delta\boldsymbol{u}) \, \mathrm{d}\Omega \, \mathrm{d}t = -\int_0^\tau \oint_{\partial\Omega} q^\dagger \, q\, (\delta\boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{n}) \, \mathrm{d}S \, \mathrm{d}t + \int_0^\tau \int_\Omega q\, (\nabla q^\dagger \cdot \delta\boldsymbol{u}) \, \mathrm{d}\Omega \, \mathrm{d}t, \tag{A14}$$

以及一个关于 $\delta\phi$ 的贡献，

$$\begin{aligned} \int_0^\tau \int_\Omega q^\dagger \, \nabla \cdot (q\, \nabla\delta\phi) \, \mathrm{d}\Omega \, \mathrm{d}t = &\int_0^\tau \oint_{\partial\Omega} q^\dagger \, q\, (\nabla\delta\phi \cdot \boldsymbol{n}) \, \mathrm{d}S \, \mathrm{d}t \\ &- \int_0^\tau \oint_{\partial\Omega} q\, (\nabla q^\dagger \cdot \boldsymbol{n})\, \delta\phi \, \mathrm{d}S \, \mathrm{d}t \\ &+ \int_0^\tau \int_\Omega \nabla \cdot (q\, \nabla q^\dagger)\, \delta\phi \, \mathrm{d}\Omega \, \mathrm{d}t, \end{aligned} \tag{A15}$$

其中散度定理已使用两次。

d. 泊松方程。利用格林第二恒等式，

$$\begin{aligned} -\int_0^\tau \int_\Omega \phi^\dagger \left(\nabla^2 \delta\phi + C\, \delta q\right) \, \mathrm{d}\Omega \, \mathrm{d}t = &-\int_0^\tau \int_\Omega \nabla^2 \phi^\dagger \, \delta\phi \, \mathrm{d}\Omega \, \mathrm{d}t \\ &+ \int_0^\tau \oint_{\partial\Omega} \left(\nabla\phi^\dagger \cdot \boldsymbol{n}\, \delta\phi - \phi^\dagger \, \nabla\delta\phi \cdot \boldsymbol{n}\right) \, \mathrm{d}S \, \mathrm{d}t \\ &- C \int_0^\tau \int_\Omega \phi^\dagger \, \delta q \, \mathrm{d}\Omega \, \mathrm{d}t. \end{aligned} \tag{A16}$$

2. 按直接变量分组的完整一阶变分

汇总上述所有贡献，并用 $\boldsymbol{w} = \boldsymbol{u} - \nabla\phi$ 表示电荷输运速度，拉格朗日量的一阶变分是四个直接场变分所产生贡献之和，

$$\delta\mathcal{L} = \delta\mathcal{L}_{\boldsymbol{u}} + \delta\mathcal{L}_p + \delta\mathcal{L}_q + \delta\mathcal{L}_\phi, \tag{A17}$$

其中每一项都包含其终端项和初始项、体积项和边界项。

a. 速度变分。其中的项 $\delta\boldsymbol{u}$ are

$$\begin{aligned}\delta\mathcal{L}_{\boldsymbol{u}} = &\int_\Omega \left[\boldsymbol{u}(\tau) - \boldsymbol{u}^\dagger(\tau)\right]\cdot\delta\boldsymbol{u}(\tau)\,\mathrm{d}\Omega + \int_\Omega \boldsymbol{u}^\dagger(0)\cdot\delta\boldsymbol{u}(0)\,\mathrm{d}\Omega \\ &+ \int_0^\tau\!\!\int_\Omega \delta\boldsymbol{u}\cdot\left[\partial_t\boldsymbol{u}^\dagger + (\boldsymbol{u}\cdot\nabla)\boldsymbol{u}^\dagger - (\nabla\boldsymbol{u})^\mathsf{T}\cdot\boldsymbol{u}^\dagger + \nabla p^\dagger + \nu\nabla^2\boldsymbol{u}^\dagger + q\nabla q^\dagger\right]\mathrm{d}\Omega\,\mathrm{d}t \\ &+ \int_0^\tau\!\!\oint_{\partial\Omega}\left\{\delta\boldsymbol{u}\cdot\left[-(\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{n})\boldsymbol{u}^\dagger - \nu\,\partial_n\boldsymbol{u}^\dagger - (p^\dagger + qq^\dagger)\,\boldsymbol{n}\right] + \nu\,\boldsymbol{u}^\dagger\cdot\partial_n\delta\boldsymbol{u}\right\}\mathrm{d}S\,\mathrm{d}t. \quad \text{(A18)}\end{aligned}$$

b. 压力变分。 压力仅通过动量方程的项 $\nabla\delta p$进入，该方程给出

$$\delta\mathcal{L}_p = \int_0^\tau\!\!\int_\Omega \delta p\,\nabla\cdot\boldsymbol{u}^\dagger\,\mathrm{d}\Omega\,\mathrm{d}t - \int_0^\tau\!\!\oint_{\partial\Omega}(\boldsymbol{u}^\dagger\cdot\boldsymbol{n})\,\delta p\,\mathrm{d}S\,\mathrm{d}t. \quad \text{(A19)}$$

c. 电荷变分。当 $\delta q(\boldsymbol{x},0) = \delta q_0'(\boldsymbol{x})$时，

$$\begin{aligned}\delta\mathcal{L}_q = &-\int_\Omega q^\dagger(\tau)\,\delta q(\tau)\,\mathrm{d}\Omega + \int_\Omega\left[q^\dagger(0) - 2\lambda q_0'\right]\delta q_0'\,\mathrm{d}\Omega \\ &+ \int_0^\tau\!\!\int_\Omega \delta q\left[\partial_t q^\dagger + \boldsymbol{w}\cdot\nabla q^\dagger - \beta\,\boldsymbol{u}^\dagger\cdot\nabla\phi - C\phi^\dagger\right]\mathrm{d}\Omega\,\mathrm{d}t - \int_0^\tau\!\!\oint_{\partial\Omega} q^\dagger\,(\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{n})\,\delta q\,\mathrm{d}S\,\mathrm{d}t. \\ &\quad \text{(A20)}\end{aligned}$$

d. 势变分。其中的项 $\delta\phi$ 为

$$\begin{aligned}\delta\mathcal{L}_\phi = &\int_0^\tau\!\!\int_\Omega \delta\phi\left[\beta\,\nabla\cdot(q\boldsymbol{u}^\dagger) + \nabla\cdot(q\nabla q^\dagger) - \nabla^2\phi^\dagger\right]\mathrm{d}\Omega\,\mathrm{d}t \\ &+ \int_0^\tau\!\!\oint_{\partial\Omega}\Big[(qq^\dagger - \phi^\dagger)\,\partial_n\delta\phi \\ &\qquad + \left(\partial_n\phi^\dagger - q\,\partial_n q^\dagger - \beta q\,\boldsymbol{u}^\dagger\cdot\boldsymbol{n}\right)\delta\phi\Big]\,\mathrm{d}S\,\mathrm{d}t. \quad \text{(A21)}\end{aligned}$$

在 $\Omega\times(0,\tau)$ 内部，每个乘以变分的括号项都会给出一个伴随方程。每个边界括号项都会给出与直接场允许变分相容的伴随边界条件。终端项给出反向积分的终端条件，其余的初始项则给出关于控制的梯度。以下将执行这些步骤。将相同的项重新整理为体积和边界贡献后，列于方程（A22）–（A23）。

3. 伴随方程

a. 体积和边界贡献。 该变分分解为体积和边界贡献， $\delta\mathcal{L} = \delta\mathcal{L}_\Omega + \delta\mathcal{L}_{\partial\Omega}$。记 $\boldsymbol{w} = \boldsymbol{u} - \nabla\phi$ 为电荷输运

速度，按直接场的变分进行归组后的体积贡献为

$$\begin{aligned}\delta\mathcal{L}_\Omega = &\int_\Omega \left[\boldsymbol{u}(\tau)-\boldsymbol{u}^\dagger(\tau)\right]\cdot\delta\boldsymbol{u}(\tau)\,\mathrm{d}\Omega + \int_\Omega \boldsymbol{u}^\dagger(0)\cdot\delta\boldsymbol{u}(0)\,\mathrm{d}\Omega\\ &+\int_0^\tau\!\!\int_\Omega \delta\boldsymbol{u}\cdot\left[\partial_t\boldsymbol{u}^\dagger+(\boldsymbol{u}\cdot\nabla)\boldsymbol{u}^\dagger-(\nabla\boldsymbol{u})^{\mathsf{T}}\cdot\boldsymbol{u}^\dagger+\nabla p^\dagger+\nu\nabla^2\boldsymbol{u}^\dagger+q\nabla q^\dagger\right]\mathrm{d}\Omega\,\mathrm{d}t\\ &+\int_0^\tau\!\!\int_\Omega \delta p\,\nabla\cdot\boldsymbol{u}^\dagger\,\mathrm{d}\Omega\,\mathrm{d}t\\ &-\int_\Omega q^\dagger(\tau)\,\delta q(\tau)\,\mathrm{d}\Omega+\int_\Omega q^\dagger(0)\,\delta q(0)\,\mathrm{d}\Omega-2\lambda\int_\Omega q_0'\,\delta q_0'\,\mathrm{d}\Omega\\ &+\int_0^\tau\!\!\int_\Omega \delta q\left[\partial_t q^\dagger+\boldsymbol{w}\cdot\nabla q^\dagger-\beta\,\boldsymbol{u}^\dagger\cdot\nabla\phi-C\phi^\dagger\right]\mathrm{d}\Omega\,\mathrm{d}t\\ &+\int_0^\tau\!\!\int_\Omega \delta\phi\left[\beta\,\nabla\cdot(q\boldsymbol{u}^\dagger)+\nabla\cdot(q\nabla q^\dagger)-\nabla^2\phi^\dagger\right]\mathrm{d}\Omega\,\mathrm{d}t. \end{aligned}\tag{A22}$$

边界贡献为

$$\begin{aligned}\delta\mathcal{L}_{\partial\Omega} = &\int_0^\tau\oint_{\partial\Omega}\Big[-(\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{n})(\boldsymbol{u}^\dagger\cdot\delta\boldsymbol{u})+\nu\,\boldsymbol{u}^\dagger\cdot\partial_n\delta\boldsymbol{u}\\ &\qquad-\nu\,\delta\boldsymbol{u}\cdot\partial_n\boldsymbol{u}^\dagger-p^\dagger\,\delta\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{n}-qq^\dagger\,\delta\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{n}\Big]\,\mathrm{d}S\,\mathrm{d}t\\ &-\int_0^\tau\oint_{\partial\Omega}(\boldsymbol{u}^\dagger\cdot\boldsymbol{n})\,\delta p\,\mathrm{d}S\,\mathrm{d}t-\int_0^\tau\oint_{\partial\Omega}q^\dagger\,(\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{n})\,\delta q\,\mathrm{d}S\,\mathrm{d}t\\ &+\int_0^\tau\oint_{\partial\Omega}\Big[(qq^\dagger-\phi^\dagger)\,\partial_n\delta\phi\\ &\qquad+\left(\partial_n\phi^\dagger-q\,\partial_n q^\dagger-\beta q\,\boldsymbol{u}^\dagger\cdot\boldsymbol{n}\right)\delta\phi\Big]\,\mathrm{d}S\,\mathrm{d}t. \end{aligned}\tag{A23}$$

b. 伴随体方程。 由于直接场的变分在 Ω内部是任意的， $\delta\boldsymbol{u}$、 δp、 δq 和 $\delta\phi$ 在方程 (A22) 中的系数必须分别为零。由此得到连续伴随方程

$$\frac{\partial\boldsymbol{u}^\dagger}{\partial t}+(\boldsymbol{u}\cdot\nabla)\boldsymbol{u}^\dagger-(\nabla\boldsymbol{u})^{\mathsf{T}}\cdot\boldsymbol{u}^\dagger+\nabla p^\dagger+\nu\nabla^2\boldsymbol{u}^\dagger+q\nabla q^\dagger=0,\tag{A24}$$

$$\nabla\cdot\boldsymbol{u}^\dagger=0,\tag{A25}$$

$$\frac{\partial q^\dagger}{\partial t}+(\boldsymbol{u}-\nabla\phi)\cdot\nabla q^\dagger-\beta\,\boldsymbol{u}^\dagger\cdot\nabla\phi-C\phi^\dagger=0,\tag{A26}$$

$$\beta\,\nabla\cdot(q\boldsymbol{u}^\dagger)+\nabla\cdot(q\nabla q^\dagger)-\nabla^2\phi^\dagger=0.\tag{A27}$$

利用 $\boldsymbol{E}=-\nabla\phi$，最后两个方程也可等价地写为

$$\frac{\partial q^\dagger}{\partial t}+(\boldsymbol{u}+\boldsymbol{E})\cdot\nabla q^\dagger+\beta\,\boldsymbol{u}^\dagger\cdot\boldsymbol{E}-C\phi^\dagger=0,\tag{A28}$$

$$\nabla^2\phi^\dagger-\nabla\cdot\left[q\,(\nabla q^\dagger+\beta\boldsymbol{u}^\dagger)\right]=0.\tag{A29}$$

方程 (A24)–(A27) 沿非线性正向轨迹从 $t=\tau$ 到 $t=0$按时间反向求解。

c. 伴随边界条件。 伴随边界条件通过要求边界贡献（式（A23）对直接场的每个可允许变分均为零而得到。在电极处，直接速度满足无滑移条件，因此 $\delta\boldsymbol{u}=0$ 在 $\Gamma_i\cup\Gamma_c$处。尽管$\delta\boldsymbol{u}$ 在那里为零，但其法向导数是任意的，黏性边界项要求

$$\boldsymbol{u}^\dagger=\boldsymbol{0}\quad\text{on }\Gamma_i\cup\Gamma_c.\tag{A30}$$

在计算中使用的周期层中，两个侧向边界的贡献两两抵消，因此不会产生侧向伴随条件。相反，对于由对称壁界定的区域，直接对称条件 $u_x = 0$, $\partial u_y/\partial x = 0$ 意味着 $\delta u_x = 0$, $\partial \delta u_y/\partial x = 0$，代入速度边界项可得伴随对称条件

$$u_x^\dagger = 0, \qquad \frac{\partial u_y^\dagger}{\partial x} = 0 \quad \text{on } \Gamma_s. \tag{A31}$$

这些条件还使 δp 中的边界项消失，因为在 $\partial\Omega$ 上， $\boldsymbol{u}^\dagger \cdot \boldsymbol{n} = 0$ 。

对于电荷密度，在注入器处规定了其直接值，因此在 Γ_i 上， $\delta q = 0$ 。在收集极处， δq 是任意的。由于电荷输运速度 $\boldsymbol{w} = \boldsymbol{u} - \nabla\phi$ 在那里具有非零法向分量，电荷边界项要求

$$q^\dagger = 0 \quad \text{on } \Gamma_c. \tag{A32}$$

在侧向对称边界上， $\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{n} = 0$ 和 $\partial_n\phi = 0$，因此 $\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{n} = 0$。于是电荷边界项恒等地消失，并且那里不对 $q^\dagger$ 产生任何条件。

电势在两个电极处均已规定，因此 $\delta\phi = 0$ 在 $\Gamma_i \cup \Gamma_c$，而 $\partial_n\delta\phi$仍为任意值。因此，式（A23）中 $\partial_n\delta\phi$ 的系数必须为零：

$$\phi^\dagger = q q^\dagger \quad \text{on } \Gamma_i \cup \Gamma_c. \tag{A33}$$

特别地，由于在收集极处 $q^\dagger = 0$ ，在 Γ_c 上 $\phi^\dagger = 0$ 。在侧向边界上，直接条件为 $\partial_n\phi = 0$，因此 $\partial_n\delta\phi = 0$，而 $\delta\phi$ 是任意的。 $\delta\phi$ 的剩余系数给出 $\partial_n\phi^\dagger - q\,\partial_n q^\dagger - \beta q\,\boldsymbol{u}^\dagger\cdot\boldsymbol{n} = 0$；结合 $\boldsymbol{u}^\dagger\cdot\boldsymbol{n} = 0$，可化简为

$$\partial_n\phi^\dagger = q\,\partial_n q^\dagger \quad \text{on } \Gamma_s. \tag{A34}$$

d. 终端条件。方程（A22）中的终端项为

$$\int_\Omega \left[\boldsymbol{u}(\tau) - \boldsymbol{u}^\dagger(\tau)\right]\cdot\delta\boldsymbol{u}(\tau)\,\mathrm{d}\Omega - \int_\Omega q^\dagger(\tau)\,\delta q(\tau)\,\mathrm{d}\Omega. \tag{A35}$$

由于 $\delta\boldsymbol{u}(\tau)$ 和 $\delta q(\tau)$ 是任意的，时变伴随变量的终端条件为

$$\boldsymbol{u}^\dagger(\tau) = \boldsymbol{u}(\tau), \qquad q^\dagger(\tau) = 0. \tag{A36}$$

无需满足终端条件 $\phi^\dagger$，因为方程（A27）是椭圆型方程，并且在反向积分的每个时刻求解。类似地， $p^\dagger$ 充当拉格朗日乘子，以施加伴随不可压缩约束。

e. 关于初始电荷扰动的梯度。初始速度固定，且仅将初始电荷扰动 q_0' 用作控制。由于 $q(\boldsymbol{x},\,0) = q_b(\boldsymbol{x}) + q_0'(\boldsymbol{x})$，因此有 $\delta q(\boldsymbol{x},\,0) = \delta q_0'(\boldsymbol{x})$。施加伴随体方程、边界条件和终端条件后，与控制相关的唯一剩余一阶项为

$$\delta\mathcal{L} = \int_\Omega \left[q^\dagger(\boldsymbol{x},0) - 2\lambda q_0'(\boldsymbol{x})\right]\delta q_0'(\boldsymbol{x})\,\mathrm{d}\Omega. \tag{A37}$$

因此，增广拉格朗日量关于初始扰动的泛函导数为

$$\frac{\delta\mathcal{L}}{\delta q_0'} = q^\dagger(\boldsymbol{x},0) - 2\lambda q_0'(\boldsymbol{x}). \tag{A38}$$

在约束驻点处，该导数为零，因此 $q^\dagger(\boldsymbol{x},\,0) = 2\lambda q_0'(\boldsymbol{x})$。最优初始电荷扰动与初始伴随电荷场平行。如果

振幅约束通过投影单独处理，则约化目标函数的无约束梯度就是

$$g = \frac{\delta J}{\delta q_0'} = q^\dagger(\boldsymbol{x}, 0), \tag{A39}$$

且只有其沿式（24）恒振幅超球面的切向分量才是可接受的上升方向，

$$g_T = q^\dagger(\boldsymbol{x}, 0) - \frac{\langle q^\dagger(\boldsymbol{x}, 0), q_0' \rangle}{E_0}\, q_0'. \tag{A40}$$

附录B：直接问题的整体弱形式

本附录给出离散直接问题，其形式与自动伴随（第IIIC节）求解并求导时完全一致。

a. 函数空间。设$\mathcal{T}_h$ 为周期层 $\Omega = [0, L) \times [0, 1]$的结构化四边形网格， Q_k为每个坐标方向上次数为 k、关于 x 周期的连续分片多项式空间。扰动场取自

$$\begin{aligned} &\boldsymbol{u}' \in \boldsymbol{V}_h = \{\boldsymbol{v} \in Q_2^2 :\ \boldsymbol{v} = \boldsymbol{0} \text{ on } \Gamma_i \cup \Gamma_c\}, \quad && p' \in Q_h = Q_1/\mathbb{R}, \\ &q' \in R_h = \{w \in Q_1 :\ w = 0 \text{ on } \Gamma_i\}, && \phi' \in P_h = \{\psi \in Q_2 :\ \psi = 0 \text{ on } \Gamma_i \cup \Gamma_c\}, \end{aligned} \tag{B1}$$

以及 $\boldsymbol{z}' = (\boldsymbol{u}', p', q', \phi') \in W_h = \boldsymbol{V}_h \times Q_h \times R_h \times P_h$。压力仅定义到一个常数，因此从牛顿和伴随线性系统中去除该零空间。式（17）的基态 $\boldsymbol{z}_b = (\boldsymbol{0}, p_b, q_b, \phi_b)$，其中 $p_b = CM^2 E_i\, y$，采用相同的函数空间进行插值（不施加边界约束），总场为

$$\boldsymbol{u} = \boldsymbol{u}', \qquad p = p_b + p', \qquad q = q_b + q', \qquad \phi = \phi_b + \phi'. \tag{B2}$$

内积为 $(a,\ b) = \int_\Omega a\, b\, \mathrm{d}\Omega$，且 $\nu = M^2/T$， $\beta = CM^2$如附录 A所示。

b. 时间离散。 对于扰动场 f， $n+1$层的时间导数 is

$$\begin{aligned} D_t f^{n+1} &= \frac{a_0 f^{n+1} + a_1 f^n + a_2 f^{n-1}}{\Delta t}, \\ (a_0, a_1, a_2) &= \begin{cases} (1, -1, 0), & n = 0 \text{ (backward Euler)}, \\ (\frac{3}{2}, -2, \frac{1}{2}), & n \geq 1 \text{ (BDF2)}. \end{cases} \end{aligned} \tag{B3}$$

由于基态是稳态的， D_t 仅作用于扰动。只有 $\boldsymbol{u}'$ 和 q' 包含时间导数，而 p' 和 ϕ' 则由各层的约束确定。

c. 稳态残差。 对于总状态 $\boldsymbol{z} = (\boldsymbol{u},\ p,\ q,\ \phi)$ 和检验函数 $(\boldsymbol{v},\ s,\ w,\ \psi) \in W_h$，定义电荷输运速度 $\boldsymbol{v}_q = \boldsymbol{u} - \nabla\phi$，以及不含时间导数的强形式电荷残差

$$r_q(\boldsymbol{z}) = \boldsymbol{v}_q \cdot \nabla q + C\, q^2, \tag{B4}$$

这是式（13）在使用 $\nabla \cdot \boldsymbol{E} = Cq$ （式（14））后得到的非守恒形式，以及每个网格单元上的 SUPG 参数 K

$$\tau_K(\boldsymbol{z}) = \left[\left(2|\boldsymbol{v}_q|/h_K\right)^2 + (2Cq)^2 \right]^{-1/2}, \tag{B5}$$

其中 h_K 是 K的两个顶点之间的最大距离。稳态残差为

$$\begin{aligned} \mathcal{S}(\boldsymbol{z}; \boldsymbol{v}, s, w, \psi) = &\big((\boldsymbol{u} \cdot \nabla)\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}\big) + \nu(\nabla \boldsymbol{u}, \nabla \boldsymbol{v}) - (p, \nabla \cdot \boldsymbol{v}) + \beta\,(q \nabla\phi, \boldsymbol{v}) + (\nabla \cdot \boldsymbol{u}, s) \\ &+ (\nabla\phi, \nabla\psi) - C(q, \psi) + \big(r_q(\boldsymbol{z}), w\big) + \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \big(\tau_K\, r_q(\boldsymbol{z}),\ \boldsymbol{v}_q \cdot \nabla w\big)_K. \end{aligned} \tag{B6}$$

动量项是方程（11）的弱形式，其中 $-\beta\, q\boldsymbol{E} = \beta\, q\nabla\phi$。边界积分消失，这是因为 $\boldsymbol{v} = \mathbf{0}$，并且 $\psi = 0$ 在电极上成立，而侧向边界满足周期性条件。电荷方程没有出现边界项，因为它采用强形式进行测试。电荷条件仅在注入器处施加，而在收集极处不施加任何条件，因为电荷会在那里离开该层。

d. 时间步残差。 在每个层级上，扰动 $\boldsymbol{z}'^{n+1} \in W_h$ 对所有检验函数都满足

$$\mathcal{F}(\boldsymbol{z}'^{n+1}; \boldsymbol{v}, s, w, \psi) \equiv \big(D_t \boldsymbol{u}'^{n+1}, \boldsymbol{v}\big) + \big(D_t q'^{n+1}, w\big) + \sum_K \big(\tau_K\, D_t q'^{n+1},\, \boldsymbol{v}_q \cdot \nabla w\big)_K + \mathcal{S}(\boldsymbol{z}_b + \boldsymbol{z}'^{n+1}; \boldsymbol{v}, s, w, \psi) - \mathcal{S}(\boldsymbol{z}_b; \boldsymbol{v}, s, w, \psi) = 0, \quad \text{(B7)}$$

其中，$\boldsymbol{z}'^{n+1}$ τ_K $\boldsymbol{v}_q$ $\boldsymbol{z}_b +$ 以及时间导数 SUPG 项中的相关量均在总状态下进行计算，因此 SUPG项对完整的强残差进行加权 $D_t q' + r_{q^\circ}$ 减去基态残差 $\mathcal{S}(\boldsymbol{z}_b)$ 使得 $\boldsymbol{z}' = 0$ 对于任意网格和时间步都成为精确的离散解（第 IIIC节）。

e. 非线性求解。 方程（B7）通过牛顿法同时对所有未知量进行求解，

$$\mathsf{J}\big(\boldsymbol{z}'^{(k)}\big)\,\delta\boldsymbol{z} = -\mathcal{F}\big(\boldsymbol{z}'^{(k)}\big), \qquad \boldsymbol{z}'^{(k+1)} = \boldsymbol{z}'^{(k)} + \delta\boldsymbol{z}, \quad \text{(B8)}$$

其中雅可比矩阵J 是方程（B7）的精确 Gâteaux 导数，包括 τ_K 和 $\boldsymbol{v}_q$的导数，并由符号形式组装而成。迭代从前一时间层级开始，当残差范数或相对牛顿步长低于规定的容差时停止。线性方程组通过带零主元检测的稀疏直接分解求解，并投影去除常压力模态。

f. 初始条件、目标函数与控制。积分从 $\boldsymbol{u}'^{0} = \mathbf{0}$ 一个 d $q'^{0} = q'_0 \in R_h$，其中 q'_0 位于球面上（q'_0，q'_0）$= E_{0^\circ}$ 经过 $N = \tau/\Delta t$ 步后，目标函数 i s

$$J = \tfrac{1}{2}\big(\boldsymbol{u}'^{N}, \boldsymbol{u}'^{N}\big). \quad \text{(B9)}$$

离散伴随通过在每个层级转置方程（B7）的雅可比矩阵并进行时间反向求解而得。因此，对于该离散化，它是 J 相对于q'_0 的精确导数，其中包括 SUPG 和时间积分项，而不是对附录 A中的连续伴随进行离散化。方程（B6）在 $\boldsymbol{z}' = 0$ 处的线性化，也是边际特征值问题（方程（23））的算子，经过重新缩放 $p' \mapsto (T/M^2)\, p'$后，该问题关于 T呈线性。

附录 C：渡越时间模态

在本附录中，我们推导基态水平方向均匀扰动（即渡越时间模态）的色散关系，方程（46）。我们表明，即使不存在流体流动，这些振荡模态也依然存在。

考虑一个与 x 无关的基态小扰动，

$$\boldsymbol{u}' = \boldsymbol{u}'(y,t), \qquad p' = p'(y,t), \qquad q' = q'(y,t), \qquad \phi' = \phi'(y,t), \quad \text{(C1)}$$

并对方程关于扰动振幅进行线性化。速度扰动不可压缩，$\nabla\cdot\ \boldsymbol{u}' = 0$，因此连续性方程给出 $\partial_y u'_y = 0$，壁面条件给出$u'_y \equiv 0$。水平速度满足 $\partial_t u'_x = (M^2/T)\partial_{yy} u'_x$，因为库仑力和压力梯度都没有 x 分量。其模态为黏性剪切模态$\sigma = -(M^2/T)(m\pi)^2$,，第 V E 节的有限元算子可将其复现至七位有效数字。压力平衡库仑力扰动。因此，电荷不受流动影响，剩下的问题纯属电学问题，

$$\partial_t q' + \partial_y\big(E_b q' + q_b E'_y\big) = 0, \qquad \partial_y E'_y = C q', \qquad q'(0,\ t) = 0, \qquad \int_0^1 E'_y \mathrm{d}y = 0, \quad \text{(C2)}$$

最后一个条件表示外加电压固定。对于与 x 无关的扰动，项 $\partial_y(q'E'_y)$ 是唯一被舍弃的非线性项，因为 $u'_y \equiv 0$ 严格成立。

消去 q'，得到 $\partial_y[\partial_t E'_y + C(E_b q' + q_b E'_y)] = 0$。因此，总电流（位移电流与传导电流之和）的扰动在整个层内均匀，

$$\partial_t E'_y + E_b\,\partial_y E'_y + C q_b\,E'_y = I(t), \tag{C3}$$

其中，$I(t)$与总电流扰动成正比，取值使电压保持不变。在注入器处，$q' = 0$ 给出 $\partial_y E'_y = 0$，因此

$$\dot{E}'_i + C E'_i = I, \tag{C4}$$

其中，$E'_i(t) = E'_y(0,\ t)$是注入器处电场的扰动。离子从注入器移动到高度为 y 的位置所需的漂移时间为

$$\tau(y) = \int_0^y \frac{\mathrm{d}s}{E_b(s)} = \frac{1}{C}\left(\sqrt{1 + 2Cy/E_i} - 1\right), \tag{C5}$$

渡越时间为 $t_{\mathrm{tr}} = \tau(1) = C^{-1}(\sqrt{1 + 2C/E_i} - 1)$。用 τ 表示的基态为

$$y = E_i\left(\tau + \frac{C\tau^2}{2}\right), \qquad E_b = E_i(1 + C\tau), \qquad q_b = \frac{1}{1 + C\tau}. \tag{C6}$$

由于 $\partial_\tau = E_b\partial_y$，式（C3）变为$(\partial_t + \partial_\tau)E'_y + CE'_y/(1 + C\tau) = I$。算子 $\partial_t + \partial_\tau$表示沿着以速度 E_b运动的离子所取的导数。对于该离子，有$\mathrm{d}\tau/\mathrm{d}t = 1$。引入积分因子 $1 + C\tau$后，函数 $F = (1 + C\tau)E'_y$ 满足

$$(\partial_t + \partial_\tau)F = (1 + C\tau)\,I(t), \qquad F(0,t) = E'_i(t), \qquad \int_0^{t_{\mathrm{tr}}} F\,\mathrm{d}\tau = 0. \tag{C7}$$

积分条件来自式（C2）中的最后一个条件，其中作变换 $\mathrm{d}y = E_b\mathrm{d}\tau$并使用式（ E_b 中的表达式（C6）。

方程（C7）和（C4）构成关于未知量 $\{F（\tau，\ t）\ E'_i（t）\ I（t）\}$的闭合系统。我们寻求如下形式的正规模:

$$(F, E'_i, I) = (\hat{F}(\tau), \hat{E}'_i, \hat{I})\,e^{\sigma t}. \tag{C8}$$

系统变为

$$\begin{aligned} \hat{F}'(\tau) + \sigma\hat{F}(\tau) &= (1 + C\tau)\,\hat{I}, \\ \hat{I} &= (\sigma + C)\hat{E}'_i, \\ \int_0^{t_{\mathrm{tr}}} \hat{F}\,\mathrm{d}\tau &= 0. \end{aligned} \tag{C9}$$

将第一个方程乘以 $e^{\sigma\tau}$，并从 0 积分到 τ，得到

$$\hat{F}(\tau) = \hat{E}'_i\,e^{-\sigma\tau} + \hat{I}\int_0^\tau (1 + Cs)e^{-\sigma(\tau - s)}\,\mathrm{d}s. \tag{C10}$$

将此表达式代入积分条件，得到

$$A(\sigma)\hat{E}'_i + B(\sigma)\hat{I} = 0, \tag{C11}$$

with

$$A(\sigma) = \int_0^{t_{\mathrm{tr}}} e^{-\sigma\tau}\,\mathrm{d}\tau = \frac{1 - e^{-t_{\mathrm{tr}}\sigma}}{\sigma}, \tag{C12}$$

$$\begin{aligned} B(\sigma) &= \int_0^{t_{\mathrm{tr}}}\int_0^\tau (1 + Cs)e^{-\sigma(\tau - s)}\,\mathrm{d}s\,\mathrm{d}\tau \\ &= \frac{-1 + e^{-t_{\mathrm{tr}}\sigma} + t_{\mathrm{tr}}\sigma}{\sigma^2} + C\,\frac{2 - 2e^{-t_{\mathrm{tr}}\sigma} + t_{\mathrm{tr}}\sigma(-2 + t_{\mathrm{tr}}\sigma)}{2\sigma^3}. \end{aligned} \tag{C13}$$

表 VII。水平一致的渡越时间模态，适用于 $C = 10$（$t_{\rm tr} = 1.248$，$2\pi/t_{\rm tr} = 5.04$）。方程（C15）的根以及第 $n = 0$ 节谱代码的特征值 VI（适用于 $N = 60$）和第 V E节有限元算子的特征值；对于每个 M和 T，它们均相同。

m	方程（C15）的根	谱，$N = 60$	有限元
1	$-3.01437 \pm 6.09207\mathrm{i}$	$-3.01448 \pm 6.09201\mathrm{i}$	$-3.034 \pm 6.100\mathrm{i}$
2	$-4.09452 \pm 11.06757\mathrm{i}$	$-4.09478 \pm 11.06757\mathrm{i}$	$-4.144 \pm 11.126\,\mathrm{i}$
3	$-4.88280 \pm 16.07903\mathrm{i}$	$-4.88317 \pm 16.07912\mathrm{i}$	$-4.974 \pm 16.222\,\mathrm{i}$

现在系统变为

$$\begin{pmatrix} A(\sigma) & B(\sigma) \\ \sigma + C & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{E}_i' \\ \hat{I} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \tag{C14}$$

该系统要有非平凡解，行列式必须为零，由此得出 s

$$A(\sigma) + B(\sigma)(\sigma + C) = 0. \tag{C15}$$

由式（C6），在 $y = 1$ 处求值，可得

$$t_{\rm tr} + \frac{1}{2} C t_{\rm tr}^2 = \frac{1}{E_i}, \qquad 1 + C t_{\rm tr} = \frac{E_c}{E_i}, \tag{C16}$$

其中 $E_c = E_b(1)$ 为集电极电场。将式（C15）乘以 σ^3 并利用这些关系，我们将色散关系改写为

$$P(\sigma) = C^2 e^{-\sigma t_{\rm tr}}, \tag{C17}$$

with

$$P(\sigma) = \sigma^2 + (\sigma + C)\Big[\frac{\sigma^2}{E_i} - \frac{E_c}{E_i}\,\sigma + C\Big]. \tag{C18}$$

因子 σ^3 引入了方程（ $\sigma = 0$ C17）的一个三重根，但这是伪根。事实上$A(0) = t_{\rm tr}$ 和 $B(0) = t_{\rm tr}^2/2 + C t_{\rm tr}^3/6$ 均为有限正值，因此 $\sigma = 0$ 不是方程（C15）的根。三次多项式 $P(\sigma)$ 表示扰动在收集极处消失时层的响应。方程（ C17 ）右端表示经过一次渡越后，通过电压约束返回的部分。

由于 $e^{-\sigma t_{\rm tr}}$ 沿虚方向以 $2\pi\mathrm{i}/t_{\rm tr}$为周期，因此方程（C17）等价于 $-\sigma t_{\rm tr} = \mathrm{Ln}\big(P(\sigma)/C^2\big) - 2\pi\mathrm{i}m$，其中整数 m，而 Ln 是对数的主值分支。对 σ 求解后，每个分支对应一个方程:

$$\sigma_m = -\frac{1}{t_{\rm tr}}\left[\mathrm{Ln}\left(\frac{P(\sigma_m)}{C^2}\right) - 2\pi\mathrm{i}m\right], \qquad m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots \tag{C19}$$

P 的系数均为实数，因此分支 $-m$ 给出 σ_m 的复共轭，只需考虑 $m \geq 0$。每个满足 $m \geq 1$ 的分支对应一个渡越模态，而分支$m = 0$ 仅给出伪根 $\sigma = 0$。由于对数变化缓慢，其导数P'/P 与 $t_{\rm tr}$相比很小，因此相邻根之间的间隔约为$2\pi\mathrm{i}/t_{\rm tr}$，这符合扰动每经过一次渡越便返回一次的预期。

对于 $C = 10$ 通过对方程（C15）进行牛顿迭代求得并用辐角原理验证的前几个根，与表 $n = 0$ 中的谱代码模态VII进行了比较。

[1]A. Castellanos，编，电流体动力学（施普林格，维也纳，1998）。[2]D. Avsec 和 M. Luntz，《液层中的电对流涡旋》，法国科学院院刊**204**，420（1937）。

[3]P. K. Watson、J. M. Schneider 和 H. R. Till，“介电液体中空间电荷限制电流的电流体动力学稳定性。II. 实验研究”，《物理流体》13，1955（1970）。[4]J. C. Lacroix、P. Atten 和 E. J. Hopfinger，“受单极性注入作用的介电液层中的电对流”，《流体力学杂志》69，539（1975）。[5]B. Malraison 和 P. Atten，“介电液体中单极离子注入所致不稳定性的混沌行为”，《物理评论快报》49，723（1982）。[6]F. Pontiga、Castellanos 和 B. Malraison，“关于受电荷注入作用的非极性液体不稳定性的一些考量”，《物理流体》7，1348（1995）。[7]J. M. Schneider 和 P. K. Watson，“介电液体中空间电荷限制电流的电流体动力学稳定性。I. 理论研究”，《物理流体》13，1948（1970）。[8]P. Atten 和 R. Moreau，“受单极性注入作用的绝缘液体的电流体动力学稳定性”，《力学杂志》11，471（1972）。[9]A. T. Pérez 和 A. Castellanos，“电荷扩散在有限振幅电对流中的作用”，《物理评论A辑》40，5844（1989）。[10]M. Zhang、F. Martinelli、J. Wu、P. J. Schmid 和 M. Quadrio，“存在和不存在横流时电流体动力流的模态与非模态稳定性分析”，《流体力学杂志》770，319（2015）。[11]L. N. Trefethen、A. E. Trefethen、S. C. Reddy 和 T. A. Driscoll，“没有特征值的流体动力稳定性”，《科学》261，578（1993）。[12]P. Luchini 和 A. Bottaro，“稳定性分析中的伴随方程”，《流体力学年度评论》46，493（2014）。[13]C. C. T. Pringle 和 R. R. Kerswell，“利用非线性瞬态增长构造剪切流湍流的最小种子”，《物理评论快报》105，154502（2010）。[14]S. Cherubini、P. De Palma、J.-C. Robinet 和 A. Bottaro，“边界层湍流转捩的最小种子”，《流体力学杂志》689，221（2011）。[15]C. C. T. Pringle、A. P. Willis 和 R. R. Kerswell，“剪切流湍流的最小种子：利用非线性瞬态增长触及混沌边缘”，《流体力学杂志》702，415（2012）。[16]R. R. Kerswell，“非线性非模态稳定性理论”，《流体力学年度评论》50，319（2018）。[17]A. L. Heide 和 M. S. Hemati，“用于分析稀疏有限振幅扰动引起的非线性稳定性的优化框架”，《物理评论：流体》10，014401（2025）。[18]Z. Feng、M. Zhang、P. A. Vázquez 和 C. Shu，“二维电对流流动中的确定性与随机分岔”，《流体力学杂志》922，A20（2021）。[19]J. D. Skufca、J. A. Yorke 和 B. Eckhardt，“平行剪切流中的混沌边缘”，《物理评论快报》96，174101（2006）。[20]T. M. Schneider、B. Eckhardt 和 J. A. Yorke，“湍流转捩与管流中的混沌边缘”，《物理评论快报》99，034502（2007）。[21]F. Rathgeber、D. A. Ham、L. Mitchell、M. Lange、F. Luporini、A. T. T. McRae、G.-T. Bercea、G. R. Markall 和 P. H. J. Kelly，“Firedrake：通过组合抽象自动化有限元方法”，《ACM数学软件汇刊》43，24:1（2016）。[22]S. K. Mitusch、S. W. Funke 和 J. S. Dokken，“dolfin-adjoint 2018.1：适用于 FEniCS 和 Firedrake 的自动伴随”，《开源软件杂志》4，1292（2019）。[23]P. E. Farrell、D. A. Ham、S. W. Funke 和 M. E. Rognes，“自动推导高级瞬态有限元程序的伴随”，《SIAM科学计算杂志》35，C369（2013）。[24]A. T. Pérez、P. A. Vázquez、J. Wu 和 P. Traoré，“矩形容器刚性侧壁中受单极性注入作用的介电液体的电流体动力线性稳定性分析”，《流体力学杂志》758，586（2014）。[25]M. Golubitsky、I. Stewart 和 D. G. Schaeffer，《分岔理论中的奇点与群》，第II卷，《应用数学科学》第69卷（施普林格，纽约，1988）。[26]J. D. Crawford 和 E. Knobloch，“流体动力学中的对称性与对称性破缺分岔”，《流体力学年度评论》23，341（1991）。[27]H. Brezis，《泛函分析、索伯列夫空间与偏微分方程》（施普林格，纽约，2011）。[28]T. Schwedes、D. A. Ham、S. W. Funke 和 M. D. Piggott，《偏微分方程约束优化中的网格依赖性》，《施普林格地球数学简明丛书》（施普林格，查姆，2017）。[29]W. Ring 和 B. Wirth，“黎曼流形上的优化方法及其在形状空间中的应用”，《SIAM优化杂志》22，596（2012）。[30]P.-A. Absil、R. Mahony 和 R. Sepulchre，《矩阵流形上的优化算法》（普林斯顿大学出版社，2008）。[31]L. Armijo，“具有利普希茨连续一阶偏导数的函数的最小化”，《太平洋数学杂志》16，1（1966）。[32]J. Nocedal 和 S. J. Wright，《数值优化》，第2版（施普林格，2006）。[33]A. N. Brooks 和 T. J. R. Hughes，“用于对流占优流动的流线迎风/Petrov–Galerkin公式，特别强调不可压缩纳维–斯托克斯方程”，《计算方法与应用力学和工程》32，199（1982）。[34] E. Hairer 和 G. Wanner，《常微分方程求解 II：刚性问题与微分代数问题》，第2版，《施普林格计算数学丛书》第14卷（施普林格，柏林，1996）。[35]U. M. Ascher 和 L. R. Petzold，《常微分方程与微分代数方程的计算机方法》（工业与应用数学学会，费城，1998）。

[36]J. Wu、P. Traoré、A. T. Pérez 和 P. A. Vázquez，“强单极性注入引发的介电液体二维有限振幅电对流”，《静电学杂志》**74**，85（2015年）。[37]P. Traoré 和 A. T. Pérez，“强单极性注入作用下介电液体电对流的二维数值分析”，《物理流体》**24**，037102（2012年）。[38]J. Wu、P. Traoré、P. A. Vázquez 和 A. T. Pérez，“离子的单极注入引发有限二维容器中的对流起始”，《物理评论E》**88**，053018（2013年）。[39]P. Atten 和 J. C. Lacroix，“单极性注入作用下液体的非线性流体动力学稳定性”，《力学杂志》**18**，469（1979年）。[40]S. H. Strogatz，《非线性动力学与混沌：在物理学、生物学、化学和工程学中的应用》，第2版（Westview出版社，科罗拉多州博尔德，2015年）。[41]P. J. Schmid 和 D. S. Henningson，《剪切流中的稳定性与转变》，应用数学科学，第142卷（施普林格，纽约，2001年）。[42]P. J. Schmid，“非模态稳定性理论”，《流体力学年度评论》**39**，129（2007年）。[43]S. Chandrasekhar，《流体动力学与磁流体动力学稳定性》（牛津大学出版社，牛津，1961年）。