

文章编号: 1000-6893(2006)03-0365-05

二维 Rayleigh Bénard 对流系统非线性特征的 DSMC 研究

陈伟芳, 李 壮, 龙万花

(国防科学技术大学 航天与材料工程学院, 湖南 长沙 410073)

Nonlinear Characteristic Analysis of Two Dimensional Rayleigh Bénard Convective System Using Direct Simulation Monte Carlo Method

CHEN Wei fang, LI Zhuang, LONG Wai r hua

(Department of Aerospace Science, National University of Defense Technology, Changsha 410073, China)

摘 要: 应用发端于微观分子动力学的蒙特卡罗直接模拟(DSMC)方法实现了 RB(Rayleigh Bénard)对流的数值模拟,并在此基础上得到了与线性稳定性理论分析结果相一致的 RB 系统第一次分叉的临界瑞利数;通过对大瑞利数下 RB 系统中心点处温度信号进行功率谱分析,得到 RB 系统通向混沌的倍周期分叉路径,同时应用现代混沌分析方法研究了 RB 对流系统的关联维、最大 Lyapunov 指数等非线性特征。

关键词: DSMC 方法; RB 系统; 混沌; 分叉; 非线性分析

中图分类号: V211.1⁺3 文献标识码: A

Abstract: Rayleigh Bénard (RB) convective system is simulated numerically using Direct Simulation Monte Carlo (DSMC) method which origins from micro molecular dynamics. On the basis of DSMC simulation results, the critical Rayleigh number is obtained, which is consistent with the linear stability theory. The double periods bifurcate route to chaos in RB system is obtained by spectrum analysis of temperature signal on the center point of RB system; At the same time, the nonlinear characteristics such as conjunction dimensionality and Lyapunov index are obtained by modern chaotic analysis method.

Key words: DSMC method; Rayleigh Bénard system; chaos; bifurcation; nonlinear analysis

对于湍流研究而言, RB(Rayleigh Bénard)对流是一个有趣而又相当方便的非线性系统,是研究非线性现象的理想模型。所谓 RB 对流就是在一个封闭的容器内,其下表面加热而上表面冷却形成温差,从而导致容器内流体运动。这一问题的研究始于本世纪初, Bénard 首先完成了用两块水平平板隔开的一层流体中的热对流现象的实验。研究 RB 对流系统主要有两个方面的原因:从实用的观点来看,许多有趣的物理现象都与热对流有关,它可以提高人们对星际、海洋、大气及纯半导体生产中经常存在的热对流现象的认识;另一方面, RB 对流可为耗散系统非线性现象的精细研究提供理想模型,并且可以因此对湍流的发生机理取得更进一步的认知。从文献来看,现代测试技术的发展和数值计算水平的提高以及近来非线性系统科学理论的研究为深入理解 RB 对流提供了强有力的

手段。在实验研究方面, Heslot^[1]于 1987 年对以低温氦气为介质,直径和高度均为 8.7 cm 圆柱内的 RB 对流问题进行了深入细致研究,实验瑞利数(Ra)高达 10^{11} 。根据温度信号的非线性分析结果, Heslot 将 RB 对流分为对流开始、振荡、混沌、转捩、软湍流和硬湍流等 6 个区域,表明 RB 对流与壁面边界层的发展相类似。在数值计算方面,张志成^[2]等利用蒙特卡罗直接模拟(DSMC)方法研究了 RB 对流的稳定性特征。基于对 RB 对流系统现有理论的认识以及前人工作的基础,本文应用 DSMC 方法对稀薄气体状态下的 RB 系统从热传导到热对流的不稳定过程,以及 RB 系统的混沌过程进行数值模拟,并应用功率谱分析方法对 RB 系统的温度脉动信号进行分析,得到 RB 系统第一次分叉的临界瑞利数,同时应用现代混沌分析方法分析了大瑞利数下 RB 对流系统的相关维和最大 Lyapunov 指数等非线性特征。

收稿日期: 2004-11-22; 修订日期: 2005-06-29
基金项目: 国家自然科学基金(19902021)资助项目

1 DSMC 方法概述

蒙特卡罗直接模拟(Direct Simulation Monte Carlo, DSMC)方法^[3],发端于分子动力学方法,并不直接求解 Boltzmann 方程,而是模拟该方程所描述的物理过程。DSMC 方法的基本原理是在计算机中用大量的模拟分子模拟真实气体,模拟分子的位置坐标、速度分布及内能存储在计算机中,并因分子的运动与边界的碰撞以及分子间的碰撞而随时间变化,最后通过统计网格内模拟分子的运动状态实现对真实气体流动问题的模拟。模拟中时间参数与真实流动中的物理时间等同,所有的计算都是非定常的,定常流作为非定常流的长时间状态得到。DSMC 方法的关键之处在于在时间步长 Δt 内将分子的运动与碰撞解耦。迄今为止,DSMC 方法的功能已相当强大,应用领域已非常广泛,已发展成为目前惟一能够成功解决复杂三维过渡领域流动问题的最为成熟可靠的方法。

2 RB 系统分叉点的 DSMC 计算

RB 对流问题的线性稳定性分析表明,在 Boussinesq 假设下(即认为在由浮力诱导的流体运动中,当温差足够小时,除考虑浮力之外略去密度的变化),流动主要控制参数瑞利数(Ra)为

$$Ra = \frac{g\alpha\beta d^4}{\kappa\nu} \quad (1)$$

式中: $\beta = (T_0 - T_c)/d$ 为流体垂直方向的温度梯度; T_0 为下板温度; T_c 为上板的温度; d 为两板之间的距离; g 为外力加速度; α 为流体的热膨胀系数; κ 为热扩散系数; ν 为运动黏性系数。当 Ra 大于临界 Ra 时,流动由热传导状态突变到对流状态。系统在热传导状态下的温度与密度基本解分别为

$$T = T_0 - \beta y \quad (2)$$

$$\frac{\rho}{\rho_0} = \left[1 - (1-r) \frac{y}{d} \right]^{(1-r)Fr^{-1}} \quad (3)$$

式中: $r = T_c/T_0$ 为上、下两板的温度比; $Fr = 2RT_0/(gd)$ 为弗劳德数, R 和 g 分别为气体常数和外力加速度; ρ_0 为流体底层的密度。算例的计算域及边界条件处理方法如图 1 所示。两板间距 $d = 0.056$ m,计算域宽 $L = 1.13$ m。仿真分子均为 H_e ,分子模型为硬球(HS)模型。除特别声明外,初始密度、温度均按基本解给出,初始速度场根据平衡态下的 Maxwell 分布抽样给定,而底板

温度则从初始值突然增加到某一个值后保持不变。仿真的时间步长 Δt 均为分子平均碰撞时间的 $2/3$,每个网格中的仿真分子数按 Bird 的建议不少于 30 个。

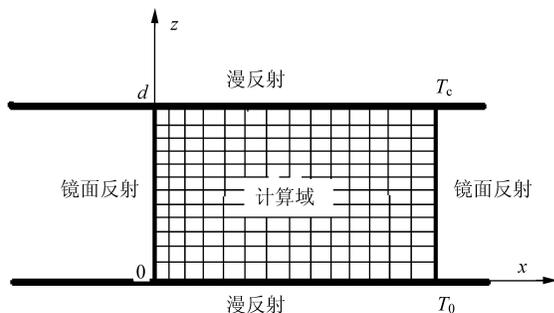
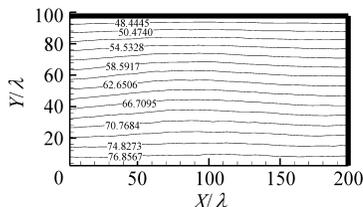


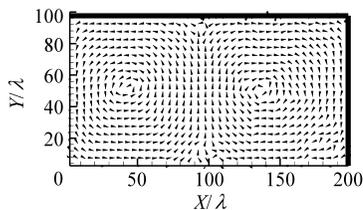
图 1 仿真计算的计算域、网格划分及边界条件示意图

Fig 1 The computing domain, grids and boundary conditions

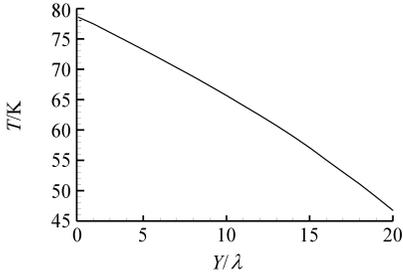
首先考察瑞利数 $Ra = 2200$ 的情形,计算结果如图 2 所示。图 2 中, λ 为分子的平均自由程。由图 2 可见,流动状态为双涡对流,温度与线性分布略有偏移,而从温度曲线中则可以明显地看到壁面附近存在的温度跳跃现象。进一步降低 Ra 到 1900,计算结果表明流动仍为双涡对流状态,如图 3 所示;而当 Ra 再进一步降低到 1650 及 1500 时,计算表明 RB 系统处于热传导状态,温度等值线的分布呈均匀平直状,如图 4 所示。计算结果表明, RB 系统中 Ra 在 1650 和 1900 之间发生第一次分叉,流动从热传导状态过渡到对流状态,这就是平时所说的 RB 对流不稳定性。本文还计算了其他 Ra 下的结果,并记录下中心点和近壁点的平均温度值随着 Ra 的变化,得到如图 5 所示的温度变化曲线。由图 5 可以看出,计算得到的临界 Ra 约为 1700,与 Rayleigh 的线性稳定性理论分析得到的临界 $Ra = 1708$ 的结果比较接近。



(a) 温度等值线图



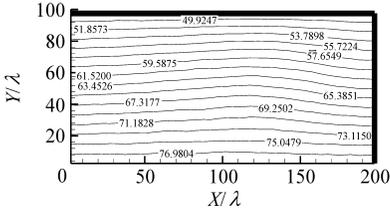
(b) 速度矢量图



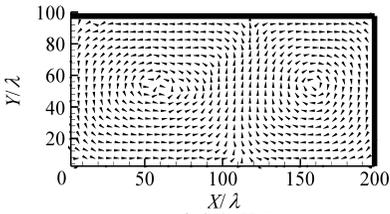
(c) 横向温度分布

图 2 温度等值线、速度矢量和横向温度分布图

Fig. 2 Contour of temperature, velocity vector and across temperature



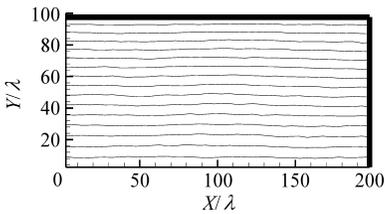
(a) 温度等值线图



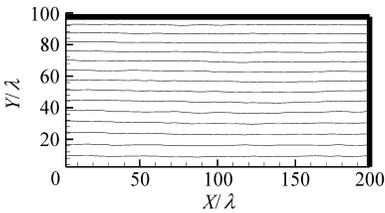
(b) 速度矢量图

图 3 温度等值线和速度矢量图

Fig. 3 Velocity vector and contour of temperature



(a) $Ra=1650$



(b) $Ra=1500$

图 4 温度等值线分布

Fig. 4 Contour of temperature

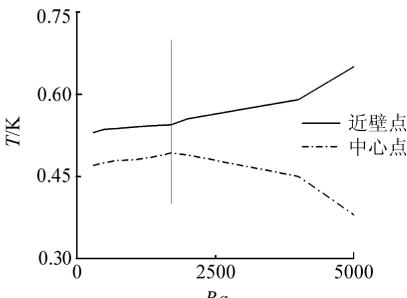
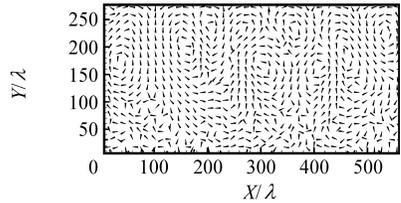


图 5 温度 (T) 平均值随着瑞利数 (Ra) 的变化

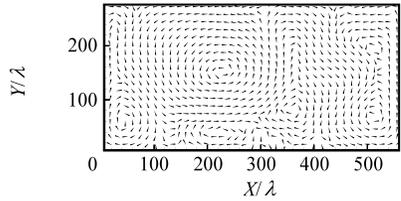
Fig. 5 Average temperature change with Ra number

3 大瑞利数下 RB 系统非定常演化过程的 DSMC 计算

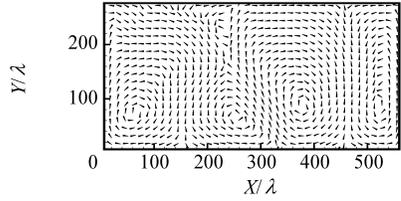
图 6 给出了 $Ra=86912$ 时 RB 系统非定常演化过程的 DSMC 计算结果。图 6 中 Δt_c 为计算时间步长。由图 6 可看出, 小涡起先从较冷的边界处生成, 逐渐向下发展, 直到占绝对优势的大涡形成, 之后保持在总体稳定但局部仍有微小变化的四涡对流的流动形态。仅给初始条件以微小的改变进行重复计算的结果表明, 流动的演化过程显著不同, 而且流动最终不再稳定于单一的对流形态。三次重复计算得到的稳定流动的结果分



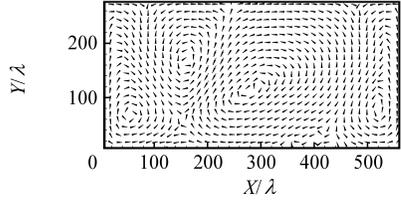
$2000\Delta t_c$



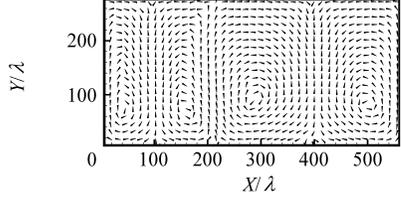
$4000\Delta t_c$



$6000\Delta t_c$



$8000\Delta t_c$



$12000\Delta t_c$

图 6 $Ra=86912$ 时流动的演化过程

Fig. 6 Evolvement of flow when $Ra=86912$

别为四涡、三涡和双涡对流,如图 7 所示。流动最后稳定在哪一种对流形态与初始条件有极大的相关性,而这正是混沌系统所特有的定性特征。这就充分说明,在此计算条件下 RB 系统已完全处于混沌状态。

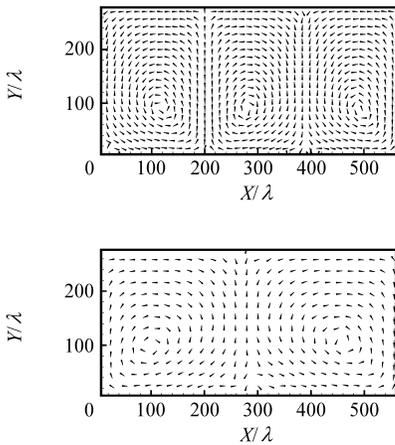


图 7 $Ra=86\ 912$ 的稳态结果

Fig 7 Steady results when $Ra=86\ 912$

4 RB 系统非线性特征分析

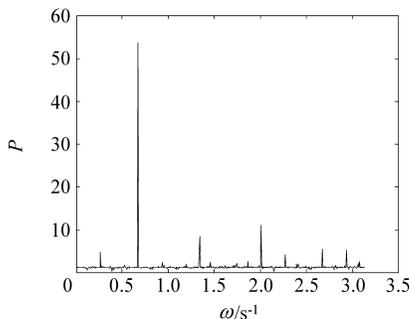
4.1 功率谱

不同的物理过程有不同的功率谱特性,从功率谱特征图上很容易看得出所分析的时间序列是属于周期过程,准周期过程,纯随机过程(白噪声),还是混沌过程。功率谱和频率的关系为

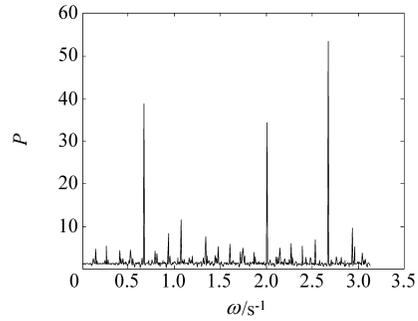
$$S(f) \sim f^{-\beta} \quad (5)$$

式中: β 为功率谱指数,也叫做标度指数; $S(f)$ 为功率谱密度; f 为频率。 $\beta=0$ 对应白噪声; $\beta=2$ 对应布朗噪声; $\beta=5/3$ 对应于湍流惯性区。功率谱分析成为实验观测和数值研究分叉与混沌的重要方法。

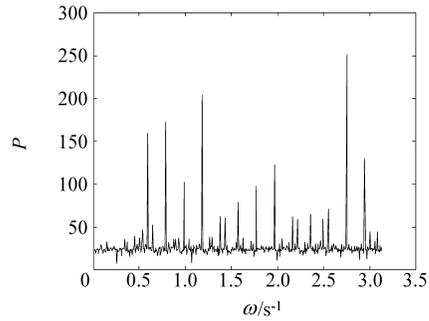
图 8 给出了不同 Ra 情况下 RB 系统中心点处温度信号的功率谱图像。由功率谱图像可以看出, $Ra=43\ 456$ 时的温度信号为周期信号, $Ra=59\ 000$ 时为准周期信号, $Ra=69\ 874$ 时仍为准周



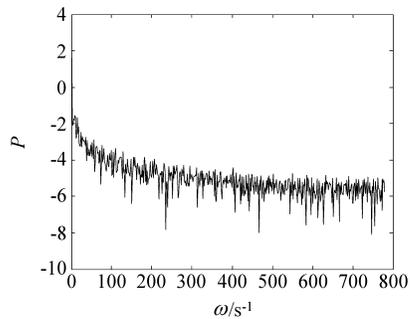
(a) $Ra=43\ 456$



(b) $Ra=59\ 000$



(c) $Ra=69\ 874$



(d) $Ra=86\ 912$

图 8 不同瑞利数下温度信号的功率谱

Fig 8 Temperature signal power chart at different Rayleigh number

期信号, $Ra=86\ 912$ 时则发展为混沌信号,并且此时计算得到的功率谱指数为 $1.664\ 55 \pm 0.101$,与湍流的标度律 $5/3$ 非常接近。图 8 的计算结果同时表明,通过 DSMC 方法构建得到的 RB 对流系统是经倍周期分支途径转换到湍流的。

4.2 关联维

假设由时间序列在 m 维相空间共生成 N 个相点 $r_1, r_2, \dots, r_i, \dots, r_N$, 随便给定一个数 r , 然后检查共有多少点对 (r_i, r_j) 之间的距离 $|r_i - r_j|$ 小于 r , 把距离小于 r 的点的对数占总点对数 N^2 的比例记作 $C(r)$, 它可以表示为

$$C(r) = \frac{1}{N^2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^D \theta(r - |r_i - r_j|) \quad (5)$$

其中 $\theta(x)$ 表示阶跃函数,即

$$\theta(x) = \begin{cases} 1 & (x > 0) \\ 0 & (x \leq 0) \end{cases} \quad (6)$$

$C(r)$ 描写了相空间上吸引子上两点距离小于 r 的概率, 刻画了相点的聚散程度。如果 r 取值太大, 所有点对的距离就不会超过它, 此时 $C(r) = 1$, $\ln C(r) = 0$, 这样的 r 就测不出相点之间的关联信息。适当的缩小测量尺度 r , 可能在 r 的一段区间内有

$$C(r) = r^D \quad (7)$$

如果这个关系存在, D 就是一种维数, 把它称为关联维(G-P 算法), 用 D_2 表示, 则

$$D_2 = \lim_{r \rightarrow 0} \frac{\ln C(r)}{\ln r} \quad (8)$$

从而在双对数图上, 可以由斜率确定关联维数 D_2 。

本文对 RB 对流系统中心点处温度信号的时间序列进行大量反复的相关维数计算, 得到以下结果: 当嵌入维数为 3 时, 由不同瑞利数 $Ra = 43\,456$, $Ra = 59\,000$, $Ra = 69\,874$, $Ra = 86\,912$ 计算得到的关联维数分别近似为 0.89, 0.92, 0.93, 1.14。容易看出, 随着瑞利数的增大, 得到的关联维数增大, 即得到的温度信号时间序列更加复杂化, 表明对应的 RB 对流系统的复杂程度也越来越高。

4.3 最大 Lyapunov 指数

如果系统最大 Lyapunov 指数大于 0, 则该系统一定是混沌状态。所以时间序列的最大 Lyapunov 指数是否大于 0 可以作为该序列是否为混沌的一个判据。

在 m 维相空间中取一初始点 $X_{10} = (x_1, x_{1+\tau}, \dots, x_{1+(m-1)\tau})$, 找出该点在欧氏距离下的最近点, 用 $L(t_0)$ 表示这两个点之间的距离; 在下一个时刻 t_1 , 原始长度将变为 $L(t_1)$, 则在某一段内最大 Lyapunov 指数为

$$\lambda = \frac{1}{t_m - t_0} \sum_{k=1}^m \frac{L(t_k)}{L(t_{k-1})} \quad (9)$$

m 是代换总步数, 运动如果混沌则 $\lambda > 0$; 反之, 运动规则, λ 小于等于 0。

本文对不同瑞利数 $Ra = 43\,456$, $Ra = 59\,000$, $Ra = 69\,874$, $Ra = 86\,912$ 下 RB 对流系统中心点处的温度信号进行了最大 Lyapunov 指数计算, 在三维相空间中得到的 Lyapunov 指数值分别为 0.0013, 0.0024, 0.0041, 0.1080。计算表明, 当 $Ra = 43\,456$, $Ra = 59\,000$, $Ra = 69\,874$ 时最

大 Lyapunov 指数都约为 0, 相差不大, 表明得到的信号为准周期或者是周期信号, 而当 $Ra = 86\,912$ 时得到的最大 Lyapunov 指数为 0.1080, 表明此时的温度信号为混沌信号。此一结果与 4.1 节给出的功率谱分析结果一致。

5 结 论

应用发端于微观分子动力学的 DSMC 方法实现了不同瑞利数下 RB 对流的数值仿真, 并在此基础上应用包括功率谱、关联维和最大 Lyapunov 指数等在内的现代混沌分析方法, 对 RB 系统中心点处的温度脉动信号的非线性特征进行了分析, 希望能从分子运动论层次得出关于湍流发生机理的一般性结论。通过本文的研究, 可得到如下结论:

(1) 可以对由 DSMC 方法仿真得到的 RB 系统中心点处温度信号时间序列数据进行非线性分析, 从而可得到关于 RB 系统的非线性特征分析。

(2) 通过记录不同瑞利数下近壁点和中心点的温度平均值, 得到无密度梯度情况下 RB 系统第一次分叉的临界瑞利数, 其值与由线性稳定性理论分析得到的临界瑞利数值非常接近。

(3) 通过对大瑞利数下 RB 系统中心点处温度信号进行功率谱分析, 得到 RB 系统通向混沌的倍周期分叉路径, 并进一步应用现代混沌分析方法研究了 RB 对流系统的非线性特征。

参 考 文 献

- [1] Heslot F, Castaing B, Libchaber A. Transition to turbulence in helium gas[J]. Phys Rev A, 1987, 36: 5870-5873.
- [2] 张志成, 陈伟芳, 吴其芬, 等. 大瑞利数下二维 Bénard 对流演化过程的 DSMC 仿真研究[J]. 空气动力学学报, 2002, 20(4): 434-440.
Zhang Z C, Chen W F, Wu Q F, et al. Investigation of Bénard convection flow under large Rayleigh numbers in rarefied gas by DSMC method[J]. Acta Aerodynamica Sinica, 2002, 20(4): 434-440. (in Chinese)
- [3] Bird G A. Molecular gas dynamics and the direct simulation of gas flows[M]. Oxford: Clarendon Press, 1994.

作者简介:

陈伟芳(1970-) 男, 湖南邵阳人, 副教授, 博士。主要研究方向为稀薄气体动力学。

(责任编辑: 鲍亚平)