arXiv:2302.02629v2 [physics.flu-dyn] 7 Jan 2025

采用 plicRDF-isoAdvector 非结构化流体体积法（VOF）的数值润湿模拟

Muhammad Hassan Asghar、Mathis Fricke、Dieter Bothe、Tomislav Mari´c*

Mathematical Modeling and Analysis Group, TU Darmstadt

摘要

这是已发表手稿的预印本版本https://doi.org/10.1016/j.camwa.2024.12.015**：引用本文内容时，请引用已发表手稿**。

几何复杂表面的润湿与去润湿数值模拟受益于贴体非结构化有限体积法，因为该方法能够以二阶精度离散几何复杂计算域边界上的边界条件，并简化模拟流程。plicRDF-isoAdvector 方法是一种非结构化几何流体体积法（VOF），通过重构有符号距离函数（RDF）来重构分段线性界面计算（PLIC）界面。该方法因其体积守恒特性和较高的计算效率而被选用于研究润湿过程。本研究通过五个不同的案例研究，对 plicRDF-isoAdvector 方法在润湿问题中的表现进行验证与确认。第一项研究考察了壁面附近的界面对流精度。随后，研究了液滴分别在平面和球面上的铺展，所得结果与参考解高度吻合。此外，还通过液滴铺展测试案例开展了一项验证研究。在接触角边界条件中引入未补偿杨应力，显著提升了数值方法的验证效果。此外，研究还考察了二维毛细上升，并基于先前工作的结果进行了数值比较。为促进后续研究以及与其他数值代码的比较，本研究所用的全部案例研究、输入数据和 Jupyter 笔记本均已公开。

*Key*关键词：润湿、几何形状复杂的表面、非结构化流体体积法

1. 引言

液体对固体表面的润湿现象广泛存在于许多自然和技术过程中，包括油漆、墨水、润滑剂、染料或农药的铺展。在许多典型应用中，固体表面并非平坦或均质，而是具有几何复杂的结构、化学非均质性或孔隙率。尤其是，大量研究已充分证明 [1]这些特征

*通讯作者*Email addresses:* asghar@mma.tu-darmstadt.de (Muhammad Hassan Asghar), fricke@mma.tu-darmstadt.de (Mathis Fricke), bothe@mma.tu-darmstadt.de (Dieter Bothe), maric@mma.tu-darmstadt.de (Tomislav Mari´c)

例如表面结构和粗糙度，可用作显著提升过程性能的手段。要描述和预测复杂表面上的润湿过程，必须开发能够处理几何复杂边界和接触线动态的仿真工具。非结构化流体体积法（VOF）（参见 [2] 近期综述）广泛用于模拟几何复杂技术系统中的两相流，因为该方法利用多面体有限体积离散，有效处理了求解域的几何复杂性。

根据体积分数平流所采用的基本方法（即相指示函数的离散形式），非结构化 VOF 方法可分为两类：代数VOF方法和几何VOF方法。代数VOF方法通过求解线性代数方程组来实现体积分数场的平流。采用代数VOF方法的知名 OpenFOAM [3] 求解器是 interFoam [4]。尽管计算效率很高，代数VOF方法仍可能因界面发生人工扩散而 [4, 5] 产生不准确的结果。另一方面，几何VOF方法会重构流体界面，以近似计算穿过单元各个面 [2]的各相体积通量（近期综述见此处）。高效的几何方法构成了 Roenby等人 [5]开发的 plicRDF-isoAdvector 非结构化几何VOF方法[5, 6] 的基础。

plicRDF-isoAdvector 方法在界面重构和界面对流步骤中均采用几何近似（参见第 2 节）。对于时间步长受限于 CFL数低于 0.2 [6]的情况，该方法在非结构网格上实现了几何VOF对流误差的 L_1-范数二阶收敛。Gamet等人 [7]验证了 plicRDF-isoAdvector 方法在上升气泡问题中的表现，并将其与 interFoam [4], 、Basilisk [8] 以及现有文献中有限元方法的结果（TP2D [9, 10], 、FreeL-IFE [11], 和 MooNMD [12]）进行了基准比较。特别是在表面张力主导的流动中，与 interFoam 相比，plicRDF-isoAdvector 方法更能准确捕捉气泡的螺旋轨迹和形状。Siriano等人 [13] 对高密度比条件下的上升气泡问题进行了数值方法测试。Lippert等人 [14] 提出了一组表面张力驱动的不可压缩两相流仿真基准。他们研究了界面处伪流的出现情况，并将 plicRDF-isoAdvector 方法与 interFoam [4], 和 Basilisk [8]进行了基准比较。他们还考察了 TwoPhaseFlow OpenFOAM 项目 [15] 中提供的不同曲率模型，并指出总体而言，Basilisk 和采用 RDF 曲率模型的 plicRDF-isoAdvector 产生的误差最小。Giefer等人 [16] 使用采用 plicRDF-isoAdvector 方法的 interFlow [15]求解器，研究了润湿性对微毛细管中界面传播的影响。他们根据黏性力与界面力之间的平衡，对不同传播状态进行了分类。这些研究表明，plicRDF-isoAdvector 方法是一种高效且准确的非结构化几何VOF方法，适用于两相流问题。本文将对 plicRDF-isoAdvector 方法在润湿问题中的应用进行验证、确认并进一步扩展。

我们研究了五个典型的润湿案例研究。对于这五个案例研究，我们已在线公开提供输入数据、主数据、次级数据和后处理工具 [17, 18, 19]。基于 Jupyter 笔记本 [20], 的后处理简化了润湿过程的确认/验证，不仅适用于 OpenFOAM，也适用于任何其他仿真软件，前提是存储次级数据（误差范数）的文件按照文档 [21, 19]所述的格式编排。

本文结构如下：第一个案例研究是 Fricke 等人 [22]提出的近壁界面平流确认测试。该测试研究界面在已知无散度速度场作用下发生平流时的数值接触角演化。结果见第 3 节。

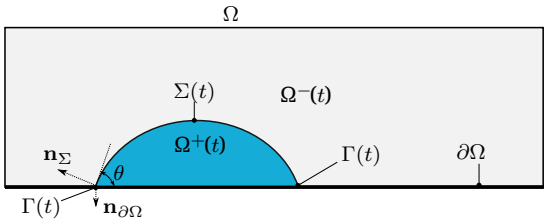


图1：带有接触线 Γ(*t*)的多相区域Ω示意图。界面 Σ(*t*)的法向量为$\mathbf{n}_\Sigma$，其与区域的固体边界 ∂Ω相交，接触角为 θ。

接下来，本文研究液滴在平坦表面上的铺展——这是一个经典的润湿验证案例研究。Dupont 和 Legendre [23] 利用静态几何关系研究了液滴形状。第 4 节研究了有重力和无重力影响下的液滴铺展。第 5 节通过 Lavi 和 Marmur [24], 的实验结果验证液滴铺展动力学，并与其他数值方法进行了比较。

随后，研究球面 [25] 上的液滴铺展，以测试 plicRDF-isoAdvector 方法在用于几何形状更复杂表面的非结构化近壁加密网格上的精度。结果见第6节。

最后，根据 Gr¨unding 等人 [26], 的研究，我们基于完整的连续介质力学模拟研究瞬态毛细上升。此处，正如 Huh 和 Scriven [27] 首次描述的接触线奇异性，通过 Navier滑移条件予以正则化。Gr¨unding 等人 [26] 表明， [28, 29], 中确定的无量纲群和 Navier滑移长度均会对上升动力学产生重大影响。本研究将毛细上升动力学的模拟结果与 [26]中的数据进行比较。结果见第7节。

本研究使用 ESI OpenFOAM 版本（git 标签 OpenFOAM-v2312） [30]。plicRDF-isoAdvector 方法使用 TwoPhaseFlow OpenFOAM 项目 [15]（of2312 分支）中的求解器 inter-Flow。设置参数研究时使用了 Python 库 PyFoam [31], 2021.6 版。初始化液滴时，使用表面网格/单元近似算法（SMCA） [32] 和精确隐式曲面计算体积分数场。使用 OpenFOAM 子模块 cfMesh [33], ，通过非结构网格对计算域进行离散；各项研究的网格划分细节将在相应章节中介绍。使用开源软件 FreeCAD [34], 0.18.4 版创建 .stl 文件。

2. 数值方法

本节概述 plicRDF-isoAdvector 数值方法 [6, 15]（整体求解算法概览见图25）。

2.1. 流体体积法

考虑图 1 所示的流动区域 Ω，该区域由两个分别被不同不可压缩流体占据的子域组成，记为 $\Omega^+(t)$ 和 $\Omega^-(t)$。相指示函数

$$\chi(t,\mathbf{x}) = \begin{cases} 1 & \mathbf{x} \in \Omega^+(t) \\ 0 & \mathbf{x} \notin \Omega^+(t) \end{cases} \tag{1}$$

用于区分子域 $\Omega^{\pm}$。显然，子域 Ω^+ 随后

$$\Omega^+(t) := \{\mathbf{x} \in \Omega : \chi(t,\mathbf{x}) = 1\}. \tag{2}$$

固定控制体积 Ω_c 在时间 t 时，其中相 $\Omega^+(t)$ 的体积分数 $\alpha_c(t)$ 定义为

$$\alpha_c(t) := \frac{1}{|\Omega_c|} \int_{\Omega_c} \chi(t,\mathbf{x})\, dV\,. \tag{3}$$

单元内体积分数的数值表示相 $\Omega^+(t)$ 是否存在于该单元中。事实上，有

$$\begin{aligned} \alpha_c = 1 &\iff \text{cell is inside } \Omega^+(t), \\ \alpha_c \in (0,1) &\iff \text{cell intersects the interface (“interface cell”)}, \\ \alpha_c = 0 &\iff \text{cell is inside } \Omega^-(t). \end{aligned} \tag{4}$$

在每个相 $\Omega^+(t)$ 或 $\Omega^-(t)$ 内，不可压缩流体的质量守恒形式为

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0, \tag{5}$$

其中$\mathbf{v}$ 是流体速度。在无相变的情况下，两相流的相指示函数沿流动轨迹保持其数值，即它满足以下输运方程（在分布意义下）

$$\partial_t \chi + \mathbf{v} \cdot \nabla \chi = 0. \tag{6}$$

在两相纳维–斯托克斯方程的单场公式中，相指示量 $\chi(t,\cdot)$ 决定了物理量的局部值随相而变化，例如单场密度 ρ 和黏度 μ。对于恒定密度 ρ^+、 ρ^- 以及恒定黏度 μ^+、 μ^-，有

$$\rho(t,\mathbf{x}) = \chi(t,\mathbf{x})\rho^+ + (1 - \chi(t,\mathbf{x}))\rho^-, \tag{7}$$

and

$$\mu(t,\mathbf{x}) = \chi(t,\mathbf{x})\mu^+ + (1 - \chi(t,\mathbf{x}))\mu^-. \tag{8}$$

动量平衡方程为

$$\partial_t(\rho\mathbf{v}) + \nabla \cdot (\rho\mathbf{v}\mathbf{v}) = -\nabla p^{'} - \nabla(\rho\mathbf{g} \cdot \mathbf{x}) + \nabla \cdot \left(\mu(\nabla\mathbf{v} + \nabla\mathbf{v}^T)\right) + \mathbf{f}_\Sigma, \tag{9}$$

其中 $p^{'} = p - \rho\mathbf{g}h$ 为修正压力，$\mathbf{g}$ 为重力加速度，且

$$\mathbf{f}_\Sigma := \sigma\kappa\mathbf{n}_\Sigma\delta_\Sigma \tag{10}$$

是表面张力 σ、平均曲率 κ 和狄拉克δ分布 δ_Σ 在界面 $\Sigma(t)$处、沿法向量$\mathbf{n}_\Sigma$作用的表面张力。

VOF 方法在一个时间步长 $[t^n, t^{n+1}]$内，对固定控制体积 Ω_c 上的式（6）进行积分，然后应用雷诺输运定理。由此可得体积分数输运方程的积分形式（详情参见 [2] ）：

$$\alpha_c(t^{n+1}) = \alpha_c(t^n) - \frac{1}{|\Omega_c|}\int_{t^n}^{t^{n+1}}\int_{\partial\Omega_c}\chi(t,\mathbf{x})\mathbf{v}\cdot\mathbf{n}\ dS\ dt. \tag{11}$$

单元 Ω_c 的边界 $\partial\Omega_c$ ，用于式（11）的右端，是由线段（边）围成的表面（面）的并集，即

$$\partial\Omega_c = \cup_{f\in F_c} S_f, \tag{12}$$

其中， F_c 是单元 Ω_c 所有面的单元局部索引集合。利用对 $\partial\Omega_c$ 的这种分解（式（12））， 式（11）可写为

$$\alpha_c(t^{n+1}) = \alpha_c(t^n) - \frac{1}{|\Omega_c|}\sum_{f\in F_c}\int_{t^n}^{t^{n+1}}\int_{S_f}\chi(t,\mathbf{x})\mathbf{v}\cdot\mathbf{n}\ dS\ dt. \tag{13}$$

式（13）右端的二重积分定义了在时间间隔 $[t^n, t^{n+1}]$ 内穿过面 S_f 的特定相体积通量 $|V_f^\alpha|$ 。由于目前尚未进行任何近似，式（13）仍是一个精确方程。它是所有几何VOF方法的基础 [2], ，这些方法最终都得到如下形式:

$$\alpha_c(t^{n+1}) = \alpha_c(t^n) - \frac{1}{|\Omega_c|}\sum_{f\in F_c} V_f^\alpha, \tag{14}$$

它们的区别仅在于 V_f^α 的计算方式。如果能够针对任意 $\mathbf{v}$ 和 χ 精确计算 V_f^α，并精确表示区域边界 $\bigcup_{c\in C}\partial\Omega_c$（其中 C 是包含所有边界面的索引集合），那么式（14）将是一个精确方程。

2.2. plicRDF-isoAdvector 方法

几何VOF方法依赖于界面的单元局部几何近似。因此，每种界面重构算法都旨在计算界面法向量 $\mathbf{n}_{\Sigma,\ c}$ （简称$\mathbf{n}_c$ ）和位置$\mathbf{P}_c$。首先，界面定向算法对$\mathbf{n}_c$进行近似。然后，界面定位算法将界面置于$\mathbf{P}_c$处。广为人知的分段线性界面计算（PLIC）算法是常用的界面重构算法。Youngs 算法 [35]、最小二乘拟合（LSF）算法 [36], 和 plicRDF 重构方法 [6] 都是基于PLIC的界面定向算法的例子。

plicRDF 重构方法 [6] 在界面单元的管状邻域内重构所谓的有符号距离函数（RDF）（参见图2）。随后，将法向量近似为RDF的离散梯度 Ψ，即,

$$\mathbf{n}_c^{k+1} = \frac{\nabla_c\Psi_c^k}{\|\nabla_c\Psi_c^k\|}, \tag{15}$$

其中， ∇_c 是离散的非结构有限体积最小二乘梯度， $k = 1,\ldots,5$ 是 [6]中使用的重构算法迭代索引。界面定位算法使用$\{\mathbf{n}_n^{k+1}\}_{n\in I}$来定位 PLIC 界面平面，其中 I 是所有界面单元的单元局部索引集，从而得到下一次迭代所需的 $\{\mathbf{P}_n^{k+1}\}_{n\in I}$ 。

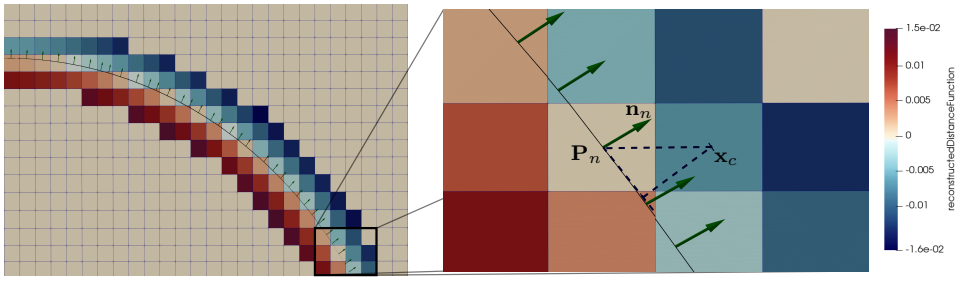


图 2：液滴的重构有符号距离函数场，该场在界面单元的管状邻域内重构。每个界面单元内的直线表示重构的界面。位于 $\mathbf{P}_n$ 处的界面法向量 $\mathbf{n}_n$，由 RDF Ψ_c 的最小二乘有限体积梯度根据式 (15) 得出。

2.2.1. isoAdvector 对流格式

isoAdvector 数值方法 [5] 计算相特定通量体积 V_f^α，其计算方式为

$$\begin{aligned} V_f^\alpha &= \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{S_f} \chi(t,\mathbf{x})\mathbf{v}\cdot\mathbf{n}\; dS\; dt = \int_{t^n}^{t^{n+1}} \mathbf{v}_f(t)\cdot\hat{\mathbf{n}}_f \int_{S_f} \chi(t,\mathbf{x})\; dS\; dt + O(h^2) \\ &= \int_{t^n}^{t^{n+1}} \frac{F_f(t)}{|S_f|} \int_{S_f} \chi(t,\mathbf{x})\; dS\; dt + O(h^2) \\ &= \frac{0.5(F_f^n + F_f^{n+1})}{|S_f|} \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{S_f} \chi(t,\mathbf{x})\; dS\; dt + O(\Delta t^2) + O(h^2) \end{aligned} \tag{16}$$

速度 $\mathbf{v}_f(t)$ 为面中心速度，由此得到 $O(h^2)$，定义 $F_f := \mathbf{v}_f \cdot \mathbf{n}_f |S_f|$，即穿过面 S_f 的体积通量。向量 $\mathbf{n}_f$ 是面 S_f 的单位法向量。对于给定的固定速度（例如，为了验证平流），速度 $\mathbf{v}_f$ 是已知的。否则，它通过求解纳维–斯托克斯方程获得，详见 [37]。

isoAdvector格式以几何方式计算积分

$$\int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{S_f} \chi(t,\mathbf{x})\; dS\; dt = \int_{t^n}^{t^{n+1}} A_f(t)\; dt, \tag{17}$$

其中，$A_f(t)$ 是时间 t 时浸没在 $\Omega^+(t)$ 中的瞬时面面积。关于浸没面面积积分的详情，参见 [5]。

计算得到相特定通量体积 V_f^α后，使用公式 (14) 更新单元体积分数数值。isoAdvector格式通过沿迎风方向重新分配 α_c 中的过冲和欠冲，恢复严格有界性 $\alpha_c \in [0,1]$。

2.2.2. 固体边界上的边界条件

下文中，我们采用固体边界 $\partial\Omega$ 静止的参考系。我们假设计算域的边界不可渗透，即，

$$\mathbf{v}_\perp\,|_{\partial\Omega} = 0, \tag{18}$$

其中 $\mathbf{v}_\perp$ 是边界法向速度分量。Navier滑移边界条件（适用于平面边界）表示为

$$\mathbf{v}_{\parallel}\big|_{\partial\Omega} = \lambda \left.\frac{\partial \mathbf{v}_{\parallel}}{\partial y}\right|_{\partial\Omega}, \tag{19}$$

其中$\mathbf{v}_{\parallel}$ 是沿边界切向的速度分量， λ 是滑移长度，而$\partial \mathbf{v}_{\parallel}/\partial y$ 是沿壁面法向方向 y的速度梯度。请注意，无滑移边界条件，即

$$\mathbf{v}_{||}\,|_{\partial\Omega} = 0, \tag{20}$$

可由式（19）在 $\lambda = 0$时恢复。本研究采用不可渗透条件（18），并同时采用 Navier 滑移（式（19））或无滑移（式（20））条件。

需要注意的是，对于无滑移情形，数值方法依靠所谓的“数值滑移” [38] 来推动接触线移动。数值滑移是平流算法固有的特性，该算法使用面心速度输运体积分数场。边界单元处的面心速度并非严格为零，因此接触线能够移动。由于数值滑移量与网格尺寸有关，使用数值滑移时，接触线速度通常会表现出网格依赖性。另一方面，只要网格能够分辨滑移长度 λ ，采用 Navier 滑移条件即可实现接触线速度的网格收敛（见第 7 节）。

尽管数值滑移与 Navier 滑移下的解在接触线动力学方面有所不同，但值得注意的是，稳态与网格无关；无论选择数值滑移还是 Navier 滑移边界条件，数值模拟结果都会收敛到参考平衡解，正如第 7 节所述。

2.2.3. 接触线处的边界条件

在接触线处，即界面与计算域边界接触的区域，接触角 θ （见图 1）由以下几何关系定义：

$$\cos\theta = -\mathbf{n}_{\Sigma} \cdot \mathbf{n}_{\partial\Omega}, \tag{21}$$

其中，$\mathbf{n}_{\partial\Omega}$ 是区域边界 $\partial\Omega$ 的单位外法向量。为简便起见，本文始终将接触角 θ 设定为平衡接触角，除非另有说明。

针对边界界面单元 Ω_c 的数值处理，Scheufler 和 Roenby [39] 引入了虚拟界面点 $\mathbf{x}_{G,c}$ 的概念，该点位于单元 Ω_c 的边界面 b 另一侧（图 3）。该点是距 PLIC质心位置 $\mathbf{P}_c$ $2\Delta x$ 的唯一点，使得虚拟界面法向量 $\mathbf{n}_{G,c}$ 的方向满足接触角边界条件。为将接触角信息传递至算法中，随后将点 $\mathbf{x}_{G,c}$ 和法向量 $\mathbf{n}_{G,c}$ 作为额外贡献，用于重构单元 Ω_c 质心$\mathbf{x}_c$ 处的 RDF。

2.2.4. 曲率模型

plicRDF-isoAdvector 方法使用公式 (10) 对表面张力进行建模。TwoPhase- Flow OpenFOAM 项目 [15] 提供了多种近似平均曲率κ 的模型（详情请参见 [39] ）。

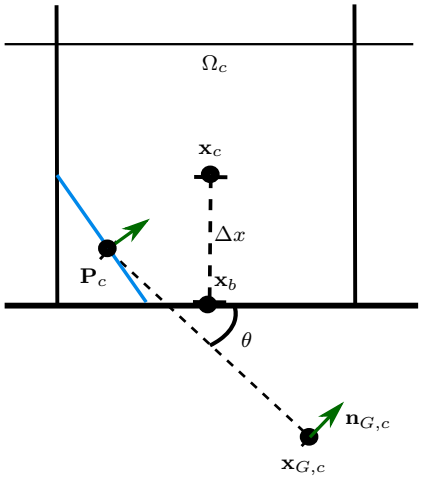


图3：plicRDF-isoAdvector 方法对接触角的处理。虚拟界面点 $\mathbf{x}_{G,\,c}$ 及其虚拟界面法向量 $\mathbf{n}_{G,\,c}$ 满足接触角边界条件，并作为额外贡献，用于重构单元 Ω_c质心处的 RDF $\mathbf{x}_c$ 。

本研究展示了使用抛物线拟合曲率模型 [39] 得到的结果。为计算界面单元 Ω_c中的平均曲率，通过对所有相邻界面网格单元内的 PLIC 质心 $\{\mathbf{P}_n\}_{n\in N_c}$ 进行拟合，计算出一个由二次型表示的表面。然后使用其中一种二次曲面来近似该表面的曲率。

采用 Navier 滑移边界条件时，使用抛物线拟合、RDF 和高度函数 曲率模型得到的模拟结果也已在线公开 [40, 41, 42]。就向平衡态收敛而言，抛物线拟合 曲率模型表现更好。

3. 接触线附近平流精度的验证

3.1. 案例研究的定义

本研究考虑在无散度速度场作用下液滴界面的平流，并报告壁面附近的界面平流精度。研究表明，[43, 44]若速度场足够光滑且与计算域边界相切，则接触线平流问题是一个适定初值问题。界面运动和接触角演化可根据速度场和初始几何形状计算得出。值得注意的是，接触角的完整时间演化可由常微分方程组的解推知 [43]。本研究复现了 Fricke 等人 [22]提出的一个案例研究。

接触角输运的运动学： 接下来，我们将研究沿流动轨迹$\mathbf{x}(t)$的接触角时间演化（运动学输运示意图见图 4），该轨迹定义为以下初值问题的解

$$\dot{\mathbf{x}}(t;t_0,x_0)=\mathbf{v}(t,\mathbf{x}(t;t_0,x_0)),\ \mathbf{x}(t_0;t_0,x_0)=\mathbf{x}_0. \tag{22}$$

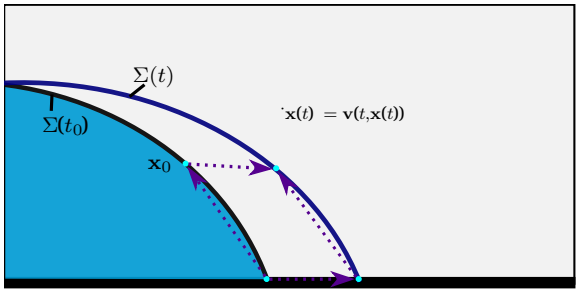


图 4：接触角的运动学输运。

简而言之，我们也可以写作$\mathbf{x}(t)$，但需牢记必须指定一个初始位置。 [43] 已证明，只要$\mathbf{v}$ 与固体边界相切，即$\mathbf{v}_\perp = 0$ 在固体边界处成立，接触线就相对于由式（22）生成的流动保持不变。这意味着，从接触线出发的轨迹始终会停留在接触线上，而函数

$$\theta(t) := \theta(t, \mathbf{x}(t))$$

定义良好。从数学上讲，接触角的时间演化可通过以下方式，根据沿$\mathbf{n}_\Sigma$ 的法向场的时间演化沿$\mathbf{x}(t)$推导得出：

$$\cos\theta(t, \mathbf{x}(t)) = -\mathbf{n}_\Sigma(t, \mathbf{x}(t)) \cdot \mathbf{n}_{\partial\Omega}(t, \mathbf{x}(t)). \tag{23}$$

常微分方程（ODE）的解

$$\dot{\boldsymbol{\nu}}(t) = -\nabla\mathbf{v}(t, \mathbf{x}(t))^{\mathsf{T}} \cdot \boldsymbol{\nu}(t),\ \boldsymbol{\nu}(t_0) = \mathbf{n}_\Sigma(t_0, x_0), \tag{24}$$

并根据以下条件对 $\boldsymbol{\nu}$ 进行归一化

$$\mathbf{n}_\Sigma(t, \mathbf{x}(t)) = \frac{\boldsymbol{\nu}(t)}{\|\boldsymbol{\nu}(t)\|} \tag{25}$$

提供 $\mathbf{n}_\Sigma(t,\ \mathbf{x}(t))$.

对于这个案例研究，我们采用了 [22] 中的一个示例。界面 Σ 由称为“盒中涡旋”的速度场输运，其定义为

$$\mathbf{v}(t, x_1, x_2) = v_0 \cos\left(\frac{\pi t}{\tau}\right)(-\sin(\pi x_1)\cos(\pi x_2), \cos(\pi x_1)\sin(\pi x_2)). \tag{26}$$

场在时间上的周期性使我们能够比较液滴在 $t = t_0$ 时的初始形状与经过时间段 τ后的形状。如果平流问题得到精确求解，那么液滴在 $t = 0$时的形状将与 $t = \tau$时的形状重合。否则，可以利用体积分数场之间的差异来量化误差。此外，输运接触角的完整时间演化可由常微分方程组（方程 (22)、(24) 和 (25)）的解得到。

3.1.1. 计算设置

我们考虑一个二维计算域，其中无量纲半径为 $R_0 = 0.2$ 的液滴 $\Omega^+(t)$ 在位置 $(0.4,\ -0.1)$ 处初始化于平坦表面 $\partial\Omega$ 上（参见图 1），由此得到初始接触角

$$\theta_0 = \cos^{-1}\left(\frac{0.1}{0.2}\right) = 60^\circ. \tag{27}$$

在本研究中，我们选择 $v_0 = 0.1$、$\tau = 0.2$，并确保库朗数满足 $Co = U\frac{\Delta t}{\Delta x} < 0.01$。我们将几何形状误差量化为

$$E_1 = \sum_c |\alpha_c(\tau) - \alpha_c(0)|V_c, \tag{28}$$

并将输运接触角的最大误差表示为

$$E_\infty = \max_{t\in[0,T]}|\theta_{\text{num}}(t) - \theta_{\text{ref}}(t)|, \tag{29}$$

其中，T 是最大模拟时间。

备注： 出于实际考虑，求解器正式指定底部边界采用无滑移边界条件，体积分数采用零梯度边界条件。然而，由于本研究仅涉及一个初值问题，解不会受到影响。

3.1.2. 模拟结果

我们使用均匀网格对计算域进行了离散化。图 5 展示了式 (26) 所给速度场的 E_1 误差收敛情况。随着网格加密程度提高，E_1 误差的收敛阶也随之提高。如图 5 所示，当网格尺寸超过某个临界值时，E_1 误差的收敛情况会发生转变。

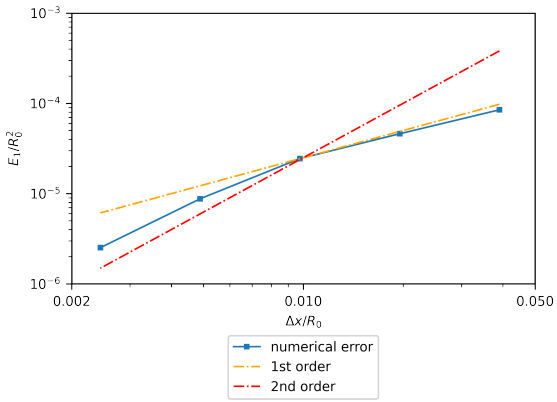


图 5：速度场 (26) 的 E_1 误差收敛情况。

图 6 展示了输运接触角数值演化的模拟结果。常微分方程（式（22）至（25））的解提供了瞬时

输运接触角 $\theta_{\text{ref}}(t)$ 的参考值。值得注意的是，对于相同的网格分辨率，即 $\Delta x/R_0 = 0.005$， [22] 中报告的绝对误差大于 isoAdvector 对流方法产生的绝对误差。然而，isoAdvector 方法在接触角演化曲线的峰值和谷值处表现出绝对误差的不对称性（参见图 6）。数值解收敛至参考解，并且对于 E_∞。呈现出接近一阶的收敛结果（见图 6）。这些发现与采用 Boundary ELVIRA 方法 [22] 得到的结果一致。

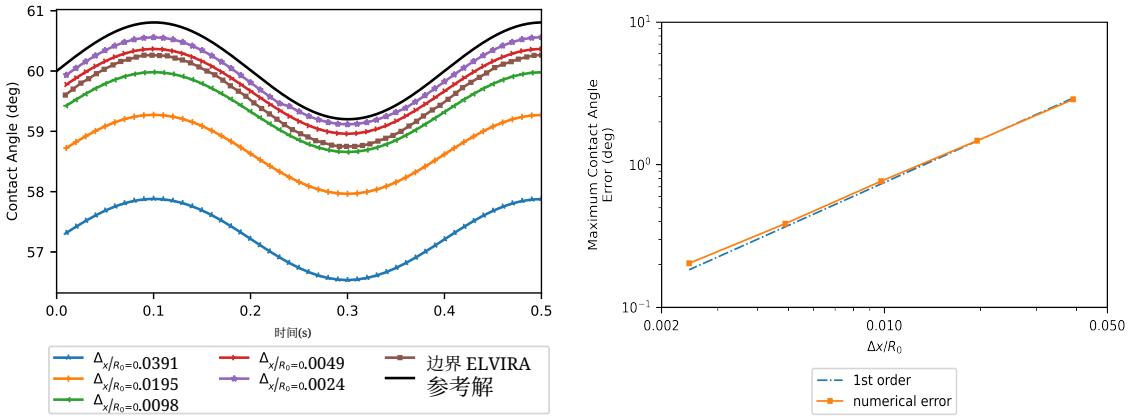


图 6：左：使用均匀网格时，速度场（式 (26)）对应的数值接触角演化。此外，还显示了边界 ELVIRA 方法 [22] 在最高可用网格分辨率下的接触角演化结果，即 $\Delta x/R_0 = 0.005$。右：输运接触角（式 (29)）的最大误差。

4. 平坦表面上的液滴铺展

4.1. 案例研究的定义

本研究考察液滴在平坦表面上的铺展 [23]。重点关注静态接触角边界条件和邦德数 $Bo = \frac{\rho_l g R_0}{\sigma}$ 对液滴平衡形状的影响。我们采用表 1 中列出的恒定物理参数，并改变重力加速度 g 的数值，以获得不同的邦德数（见表 3）。对于以 $Bo \ll 1$ 铺展的液滴，表面张力占主导地位，液滴在平衡时保持球冠形状，并满足接触角边界条件。另一方面，对于 $Bo \gg 1$，重力占主导地位，液滴形成水洼，其高度与毛细长度 $l_{Ca} = \sqrt{\frac{\sigma}{\rho_l g}}$ 成正比。利用液滴体积 V 和平衡接触角 θ_e，可推导出液滴平衡形状的几何关系 [23, 45, 25]。此外，我们还研究了铺展液滴的网格收敛性。

图7展示了在平坦表面上以初始半径 R_0 初始化的半球形液滴示意图。注意，$\theta_0 = 90°$ 是初始接触角的一个（任意）选择。液滴扩散并在 θ_e 达到平衡态，此时高度为 e，润湿半径为 L。如果初始接触角大于平衡接触角，液滴将润湿表面。

与此行为相反，如果初始接触角小于平衡接触角，我们会观察到去润湿。

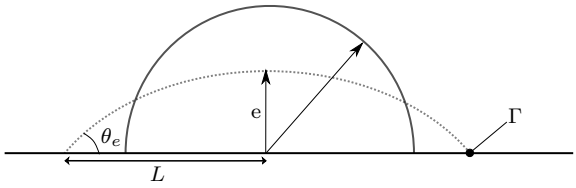


图7：液滴初始构型（–）示意图，初始半径为 R_0 ，其在平坦表面上铺展后达到最终平衡形状（...），平衡接触角为 θ_e。

我们研究了水-甘油（75%甘油）液滴和纯水液滴。水-甘油的黏度是纯水的30倍，而表面张力略低。两种液体的物理性质见表1。

流体	ρ $kg\ m^{-3}$	ν $m^2 s^{-1}$	σ Nm^{-1}
水	10^3	10^{-6}	0.072
水-甘油	1194.9	$2.51e^{-5}$	0.0635

表1：液滴的物理参数。

对采用非结构化均匀六面体网格单元离散的三维计算域进行模拟（计算域参数见表2）。液滴初始化于计算域底部边界的中心

–

$$\partial\Omega_b = \{(x, y, 0) : 0 \leq x \leq 5, 0 \leq y \leq 5\}. \tag{30}$$

参数	数值	Unit
液滴初始半径， R_0	1	mm
液滴初始位置，(x_0， y_0， z_0)	(2.5, 2.5, 0)	mm
计算域尺寸	(5， 5， 4)	mm
(n_x， n_y n_z)	(100， 100， 80)	网格单元

表2：平坦表面上液滴铺展的计算与几何参数，平衡接触角为 θ_e。

底部边界采用速度无滑移边界条件。时间步长 Δt 受限，CFL 数低于 0.01。

4.1.1. 平衡液滴的几何关系

邦德数极小时，液滴铺展达到平衡后呈球冠形状。球冠的润湿半径 L 和高度 e 由以下几何关系给出

$$\frac{L}{V^{\frac{1}{3}}} = g(\theta) \coloneqq \sin\theta \left(\frac{\pi(1-\cos\theta)^2(2+\cos\theta)}{3} \right)^{-\frac{1}{3}}, \tag{31}$$

$$e = L\tan\left(\frac{\theta}{2}\right). \tag{32}$$

球冠与水平平面的交线形成圆形接触线Γ （见图7），其面积称为润湿面积

$$A = \pi L^2. \tag{33}$$

对于邦德数较大（$Bo \gg 1$）的液滴铺展，水洼高度 e 由下式给出

$$e = 2\sqrt{\frac{\sigma}{\rho_l g}}\sin\left(\frac{\theta}{2}\right). \tag{34}$$

润湿面积 A 的估算值通过累加各边界面的润湿面积f得到，计算如下:

$$\int_{\partial\Omega} \alpha(\mathbf{x})\, ds \;= \sum_{f\in F_c} \alpha_f \|\mathbf{S_f}\|_2 + O(h^2). \tag{35}$$

这里， α_f 表示边界面的体积分数数值，该值通过函数对象中的 OpenFOAM 功能获得；$\mathbf{S_f}$ 是面f的面面积法向量。

4.2. 邦德数极小的液滴铺展

4.2.1. 收敛性研究

针对润湿面积进行了网格收敛性研究，采用了四个网格加密级别，每个液滴半径分别包含 10、16、20 和 40 个网格单元。图8a所示结果表明，对于在 $\theta_e = 50°$时的稳态，水-甘油液滴呈现收敛行为。对于较粗的网格（每个半径的网格单元数=10），由于粗网格上的数值耗散较小，润湿面积曲线出现过冲。存在数值滑移时，随着网格加密，任何过冲都会消失（如图8a所示），因为当 $\Delta x \to 0$ 趋于极限时，接触线将无法移动（Δx 为网格单元尺寸）。水-甘油液滴在 $\theta_e = 110°$时也呈现出类似的稳态收敛行为（见图8b）。与此相反，水滴表现出振荡铺展行为（见图8c和图8d）。

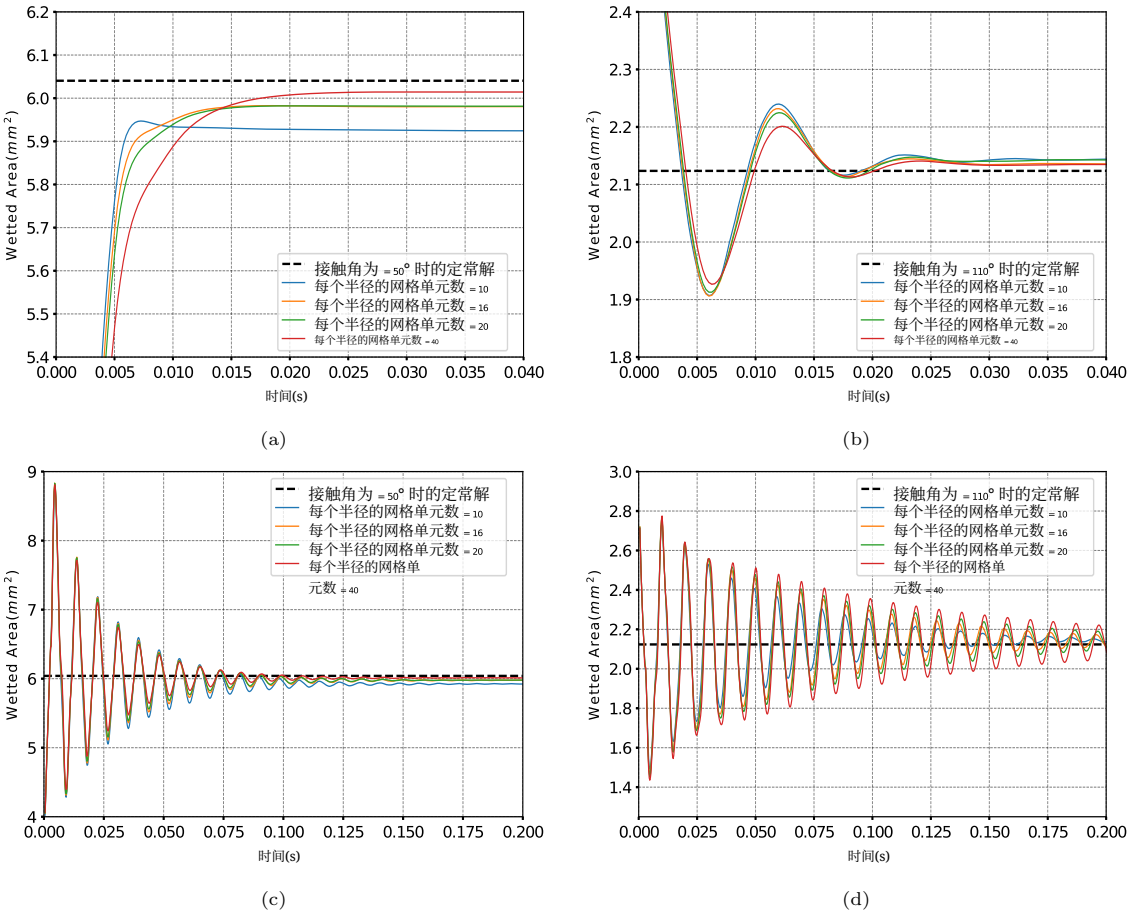
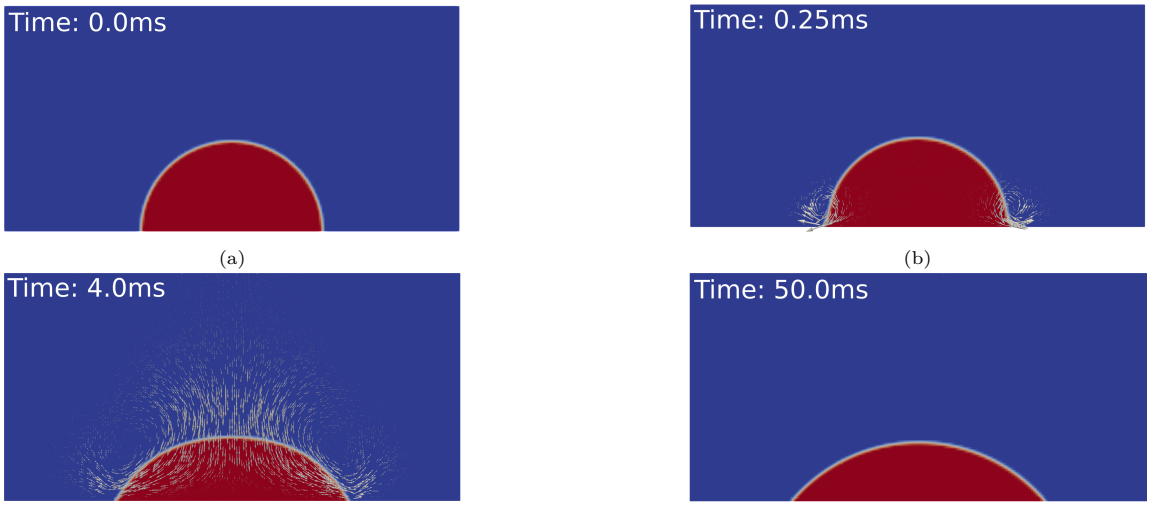


图8：水平平坦表面上铺展液滴润湿面积的收敛性研究。上方图像（图8a和图8b）和下方图像（图8c和图8d）分别展示了水-甘油液滴和水滴的铺展模拟结果，网格尺寸分别为每个半径 10，16，20 和 40 个网格单元。初始接触角为 $\theta_0 = 90°$。平衡接触角分别为 $\theta_e = 50°$（左侧，润湿）和 110°（右侧，去润湿）。定常解（式（33））以黑色水平虚线表示。

4.2.2. 液滴的几何特征

图9展示了液滴在铺展过程中的不同形态。起初，由于初始接触角与平衡接触角之间存在差异，液滴远未达到平衡态，因此接触线快速移动，而液滴的整体形状没有显著变化，如图9b所示。随着铺展继续，液滴顶点速度向下增大（图9c），液滴的整体形状开始改变，直至达到平衡态（图9d）。文献（[46, 47, 48]）也报告了类似的铺展行为。图11展示了不同接触角范围内平衡时的无量纲几何量与参考解的对比。对于亲水和疏水情况，模拟结果均与参考解非常吻合。我们



(a) (b) (c) (d)

图9：水平平坦表面上液滴在不同时刻的铺展模拟结果。初始接触角和平衡接触角分别为 $\theta_0 = 90°$ 和 $\theta_e = 50°$。箭头表示速度场。

值得注意的是，对于高度疏水的情况（例如 $\theta_e = 150°$），如果将液滴初始化为半球，则在合理的时间内无法达到稳态。这可以从初始势能的角度来理解：半球形（初始液滴）的势能非常高。势能的快速释放甚至可能导致液滴从表面脱离，如图10所示。然而，如果将液滴初始化为更接近平衡态的疏水铺展状态（即具有 $\theta_0 \approx 180°$ 的球体），则可以观察到其收敛至参考稳态，如图24所示。

如图12所示，将 ParaView [49]，中以 $\alpha = 0.5$ 等值线表示的水-甘油液滴平衡形状，与特定接触角下的参考球冠进行比较。比较结果表明，液滴的平衡形状与参考形状在定性上非常吻合。

4.3. 不同邦德数下的液滴铺展

现在，我们研究一系列邦德数下的液滴铺展情况（见表3）。这里有两种铺展行为——表面张力主导的铺展（$Bo \ll 1$）和重力主导的铺展（$Bo \gg 1$），并可在 $Bo \approx 1$ 观察到行为转变。图13展示了极限情况 $Bo \to \infty$ 和 $Bo \to 0$ 下无量纲平衡液滴高度与参考解的对比。水和水-甘油液滴的铺展模拟结果与疏水和亲水情况下的参考解高度吻合。

总之，就网格收敛性研究、液滴形状对比以及重力效应对液滴铺展的影响而言，采用 plicRDF-isoAdvector 方法得到的模拟结果与参考解高度吻合。然而，值得注意的是，对于大于 150 度的接触角，模拟结果显著依赖于初始

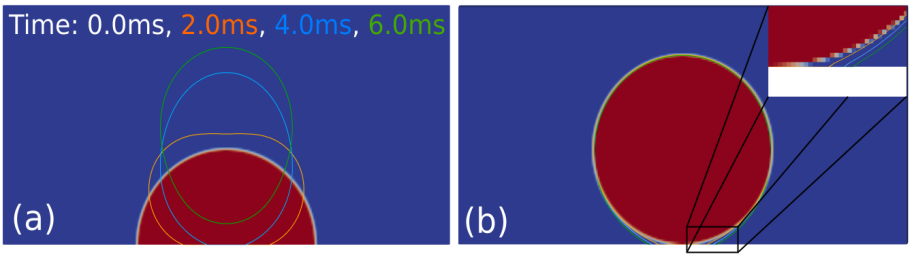


图10：液滴轮廓，轮廓颜色表示不同时刻。平衡接触角为 $\theta_e = 170°$。(a) 表示初始液滴形状为半球时的模拟结果。由于液滴中储存的势能较高，液滴在铺展过程中会脱离表面。(b) 表示液滴以完整球体为初始形状、初始接触角（$\theta_0 \approx 180°$）接近平衡接触角时的模拟结果。由于初始势能相对较低，(b) 中未观察到液滴脱离。采用 $\theta_e > 150°$ 的研究也观察到了类似行为。

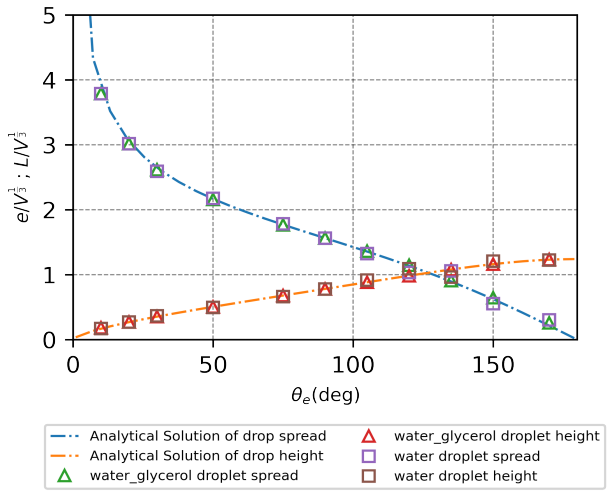


图11：液滴在水平平面上的铺展：液滴的几何特征随平衡接触角的变化 θ_e。水的润湿半径，水的平衡高度，水-甘油的润湿半径，以及水-甘油的平衡高度。润湿半径的定常解（—）和液滴平衡高度（—）分别由公式（31）和（32）给出。

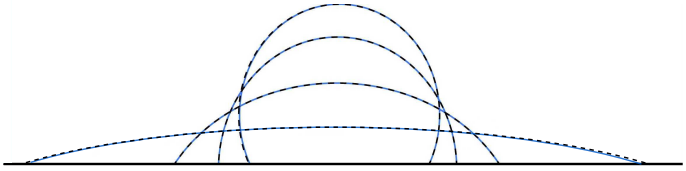


图12：液滴在水平平面上的铺展：不同平衡接触角下的平衡液滴形状：$\theta_e = 10°$、50°、90°、110°：数值的（—）和理论的（--）。

Bo - 水-甘油	1e-05	1e-02	1e-01	5e-01	1	5	10
Bo - 水	7.4e-06	7.4e-03	7.4e-02	3.7e-01	7.4e-01	3.7	7.4

Table 3: 重力作用下液滴在平坦表面上铺展时的邦德数范围 y.

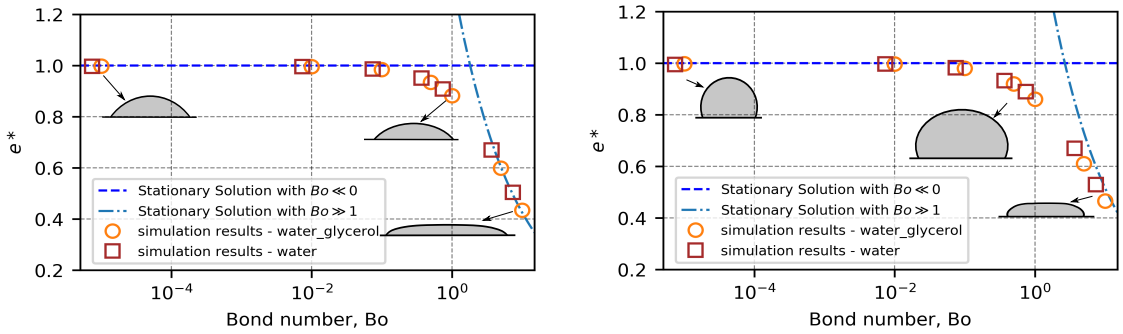


图13: 平坦表面上平衡接触角为 θ_e 时的归一化液滴高度 e^* ($e^* = e/e_0$，其中 e_0 是 $Bo \ll 1$ 时的平衡高度）；左： $\theta_e = 50°$，右： $\theta_e = 110°$。

条件。正如文献 [23, 25] 所述，处理极限平衡接触角情况对数值方法构成了挑战。本研究对极限接触角情况进行了测试，例如 $10°$ 和 $170°$。结果表明，plicRDF-isoAdvector 方法能够很好地处理这些极限情况。可以观察到，对于 $\theta_e = 10°$，平衡半径与定常解之间存在微小差异（参见图11和图12）。在这种情况下，接触线附近的液滴区域几乎平坦，形成薄膜状区域。这需要更高的局部网格分辨率，但受计算资源限制，不在本研究的讨论范围内。

5. 液滴铺展动力学验证

在本研究中，我们测试液滴铺展动力学，将模拟结果与其他数值方法进行比较，并利用 [24] 的实验结果验证 plicRDF-isoAdvector 方法。Lavi 和 Marmur [24] 进行了不同流体的实验，发现润湿面积随时间的演变可由指数幂律很好地描述

$$\frac{A}{A_e} = 1 - \exp\left(-\frac{K}{A_e}\tau^n\right), \tag{36}$$

其中， A_e 是平衡时的润湿面积， $\tau := t\sigma V^{1/3}/\mu$。本研究选择流体角鲨烷 在DTS基底上的情形进行验证。相应的物理性质和参数见表4。

μ (帕·秒)	ρ (千克/米^3)	σ (牛顿/米)	K	n
32e-3	809	34e-3	0.471	0.699

Tab图 4：DTS基底上角鲨烷液体的式（36）物理性质和参数 [24] .

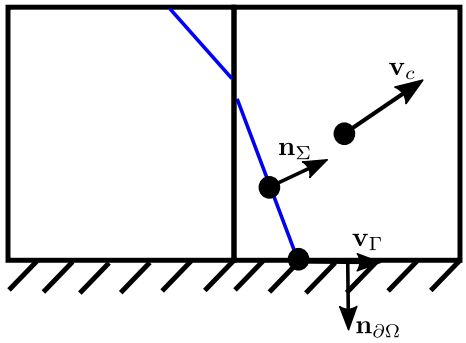


图14：与边界 $\partial\Omega$相邻的界面单元。右侧单元符合接触线单元的条件，因为界面 Σ 与计算域边界相交。接触线 Γ 以速度$\mathbf{v}_\Gamma$移动。

5.1. 案例研究的定义

此处采用与前一项研究（见第4节和图7）相同的模拟设置和边界条件。初始化液滴时，使液滴中心距壁面 $0.95R_0$ 。与前一个案例研究中采用恒定接触角（CCA）不同，此处我们采用Cox-Voinov关系 [50]

$$\theta_d^3 = \theta_m^3 + \beta \mathrm{Ca}, \tag{37}$$

作为接触角边界条件，它描述了动态接触角（DCA） θ_d、接触线毛细数 Ca $= \mu \mathrm{V}_\Gamma/\sigma$与微观接触角 θ_m之间的关系。这里， $\beta = 9\ln(\frac{l}{\lambda})$以及 l和 λ分别为宏观和微观长度尺度。

5.1.1. 接触线速度

首先，接触线速度$\mathbf{v}_\Gamma$ 的近似计算需要准确检测接触线单元（参见算法 1），因为并非所有与边界相邻的界面单元都包含接触线，如图14所示。算法 1 展示了本研究中用于检测接触线单元 [1]的方法。

边界面 f 处相对于单元中心速度 $\mathbf{v}_c$ 的相对速度 $\mathbf{v}_f$ 用于定义 V_Γ （参见图14），其定义如下

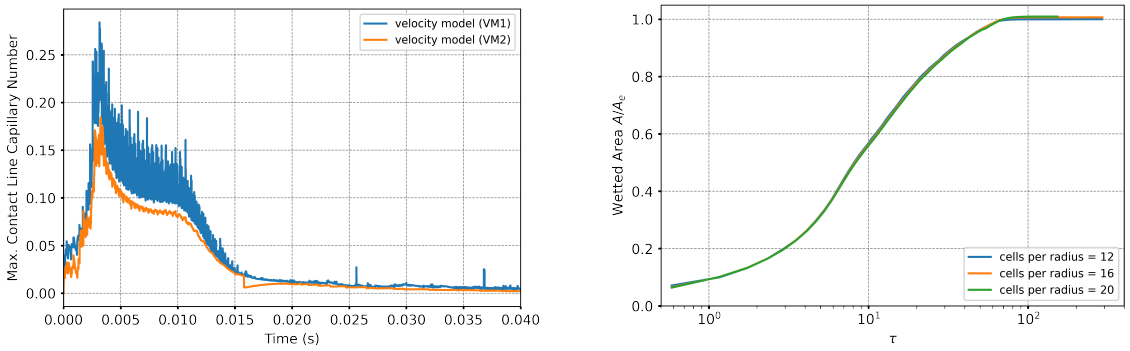
$$V_\Gamma = \frac{\mathbf{n}_\Sigma - (\mathbf{n}_{\partial\Omega} \cdot \mathbf{n}_\Sigma)\mathbf{n}_{\partial\Omega}}{|\mathbf{n}_\Sigma - (\mathbf{n}_{\partial\Omega} \cdot \mathbf{n}_\Sigma)\mathbf{n}_{\partial\Omega}|} \cdot \mathbf{v}_f. \tag{38}$$

[1]https://github.co m/CRC-1194/b01-wetting-benchmark/blob/master/src/boundaryConditions/coxVoinov/coxVoinov.C

算法 1 确定是否存在接触线

函数 HASCONTACTLINE($facei$)
  $celli \leftarrow$ $face$ i的所有者
  $normal \leftarrow cell$ i中的界面法向量
  $centre \leftarrow$ $cell$ i中的界面中心
  $vertices \leftarrow$ 获取 $face$ i的顶点
  对于 $i \leftarrow 0$ **到** size($vertices$) $- 1$ **执行**
    $dist1 \leftarrow vertices[i]$处的有符号距离
    $dist2 \leftarrow$ $vertices[i+1]$处的有符号距离
    如果 $dist1 \cdot dist2 < 0$ **则**
      返回 true ▷ 符号发生变化表示存在接触线
    结束 if
  结束 for
  返回 false ▷ 未检测到接触线
结束函数

这里采用两种速度模型来获得 $\mathbf{v}f$ ： (i) VM1，使用单元中心速度 $\mathbf{v}_c$；(ii) VM2，将$\mathbf{v}_c$ 插值到界面中心（计算细节见 [17] ）。在计算用于界面平流的速度时，VM2 模型与 isoAdvection 方法一致。isoAdvection 方法使用界面中心处的逆加权插值速度 $\mathbf{P}_\Sigma$ （计算细节见 [51] ），而不是使用单元中心速度 $\mathbf{v}_c$来平流界面。图15a显示，VM1 模型得到的毛细数始终较高，且相较于 VM2 模型所得结果偏大。使用 VM1 模型时，Ca 中会出现明显振荡；接近平衡阶段时，这可能导致液滴形状剧烈振荡。本研究后续结果采用 DCA 边界条件中的 VM2 模型。



(a) (b)

图15：(a)：速度模型 VM1 和 VM2 的最大接触线毛细数对比；两者分别采用单元中心速度和界面处的插值速度来计算$\mathbf{v}f$（参见式（38））。(b)： [24] 中角鲨烷液滴铺展动力学的收敛性研究。

此外，在数值模拟中，通常假设式（37）中的 $\theta_m = \theta_e$ 。然而，本研究采用所谓的未补偿杨应力来模拟微观接触角

式（37）中为

$$\cos\theta_m = \cos\theta_e - \tilde{\zeta}\, Ca, \tag{39}$$

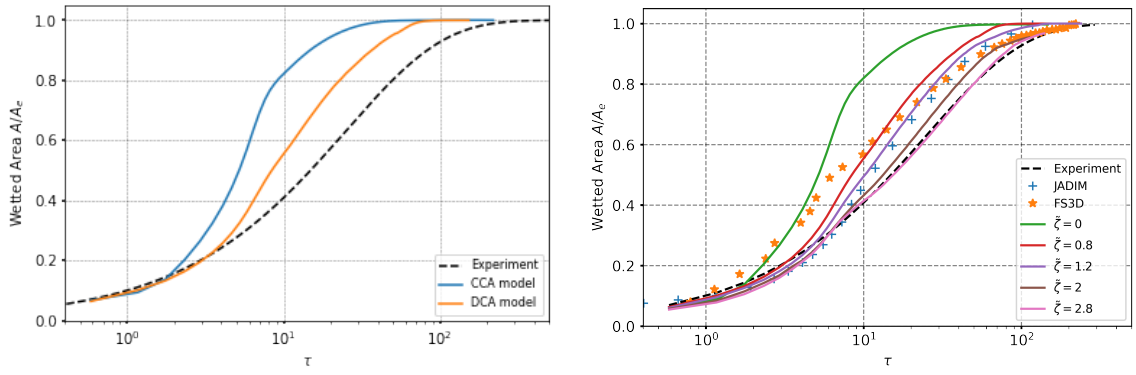
其中，$\tilde{\zeta} = \zeta/\mu$ 为无量纲接触线摩擦系数。文献指出，ζ 的数值受多种因素影响，其中包括表面的润湿性。关于该参数作用的更详细讨论见 [52, 53]。

5.1.2. 收敛性研究

图15b展示了角鲨烷液滴铺展动力学的收敛性研究 [24]。在所有网格加密层级下，动力学均呈现收敛趋势。本案例研究后续的模拟结果均采用每个半径20个网格单元的加密层级。

5.1.3. 动力学验证

图16a对比了不同的接触角模型。CCA 模型，即针对 $\zeta = 0$的模型，采用预设的接触角数值，该数值与 V_{T}无关。在铺展初期，由于初始接触角 θ_0 与预设平衡接触角 θ_e 之间的差异较大，该模型呈现出更快的动力学过程。然而，采用 θ_d 和 $\zeta > 0$ 的 DCA 模型铺展速率较慢。ζ 增大使接触线耗散增加，从而减缓了铺展速率。本研究选取了一个（任意的） $\beta = 1$ 数值，同时改变参数 ζ，结果见图16b。随后，将 plicRDF-isoAdvector 方法的模拟结果与以下方法进行比较：(a) 一种采用结构化几何 VOF 方法的自研两相流求解器 Free Surface 3D (FS3D) [54, 55]，；(b) JADIM 代码 [56, 23]。对于，在选取 $\zeta = 2.8$时，使用 plicRDF-isoAdvector 方法并根据式（37）和（39）得到的动力学结果与 [24] 的实验结果非常吻合，且优于 FS3D 方法和 JADIM 代码。



(a) (b)

图16：（a）：采用 CCA 和 DCA 模型，并使用式（39）计算 θ_m 且取 $\tilde{\zeta} = 0.8$ 时，液滴铺展动力学的比较。（b）：无量纲摩擦系数 $\tilde{\zeta}$（参见式（39））对液滴铺展动力学的影响，以及与 FS3D 求解器 [54, 55] 和 JADIM 代码 [56, 23]的比较。

本案例研究评估了 plicRDF-isoAdvector 方法在移动接触线方面的表现。通过在接触角边界条件中纳入式（39），该方法

成功捕捉了液滴铺展的动态过程。然而，研究发现，在趋近稳态时，伪流会影响系统的稳定性。未来的工作应解决这些稳定性问题。

6. 液滴在球面上的铺展

6.1. 案例研究的定义

本研究考察了在邦德数非常小（$Bo \ll 1$） [25]时，液滴在复杂球面上的铺展。如第4节所述，液滴以 $Bo \ll 1$铺展时，在平衡状态下保持球冠形状。

对三维计算域进行数值模拟，其计算域参数见表5。计算域采用非结构多面体网格单元进行离散，在固体球和液滴附近设置了加密的局部网格。加密区域的网格密度为每个半径的网格单元数25，而外部计算域区域采用较粗网格，网格密度为每个半径的网格单元数10（见图17）。初始半径为 R_0的液滴置于球面顶部。球面上的速度采用无滑移边界条件（针对接触线运动施加数值滑移 [38]）。液滴在球面上铺展，直至达到平衡，并满足静态接触角边界条件。为确保稳定性，时间步长 Δt被限制为CFL数低于0.01。

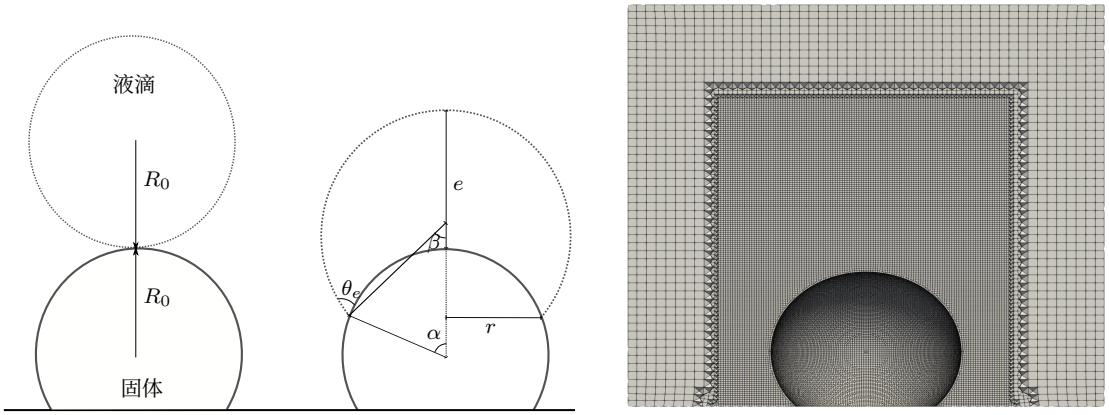


图17：液滴（.....）的初始构型示意图，初始半径为 R_0（左）；在球面（–）上铺展后的最终平衡形状（.....）（中），平衡接触角为 θ_e。平衡高度为 e，接触半径为 r。计算域网格以裁剪表面表示（右）。固体球周围的网格经过加密，感兴趣区域之外则采用较粗的网格。

参数	数值	Unit
液滴初始半径， R_0	1	mm
液滴初始位置，（x_0， y_0， z_0）	（2。5， 2。5， 2。672）	mm
球面位置，（x_s， y_s， z_s）	(2,2, 0.7)	mm
计算域尺寸	(5, 5, 5)	mm
平衡接触角， θ_e	30、50、90、110、140	deg
重力加速度，g	0.00053	ms^{-2}

表5：给定平衡接触角 θ_e 时，液滴在球面上铺展的计算与几何参数。

6.1.1. 平衡状态下液滴的几何关系

液滴体积 V 的守恒使得能够建立关于接触半径 r 和液滴高度 e的几何关系，这些关系将平衡状态下的球冠定义为

$$\begin{aligned} \alpha+\beta &= \theta_e, \\ r &= R\sin\beta = R_0\sin\alpha, \\ e &= R(1+\cos\beta) - R_0(1-\cos\alpha), \\ \frac{8\pi R_0^3}{3} &= \frac{\pi R^3}{3}(1+\cos\beta)^2(2-\cos\beta) + \frac{\pi R_0^3}{3}(1+\cos\alpha)^2(2-\cos\alpha). \end{aligned} \tag{40}$$

这里，未知参数为 α， β， r， e，和 R。已知液滴体积（$V_{\text{exact}} = \frac{4\pi R_0^3}{3}$）以及 α 和 β 的初始猜测后，通过对 k 次迭代使用二分法求解方程（40），计算中间体积 V^k（α， β， R_0）。随后，利用使$|V_{\text{exact}} - V^k$（α， β， R_0）| 最小的 α 和 β 的数值，近似求得接触半径 r 和液滴高度 e。

6.2. 后处理

图18展示了液滴在铺展过程中不同时刻的形状。液滴的铺展动力学与前文第4节讨论的平坦表面上的情况相似。铺展开始时，可以观察到接触线附近发生了初始快速铺展，如图18b所示。随着模拟时间的推移，液滴顶点速度沿向下方向增大（图18c），液滴的整体形状开始发生变化，直至达到平衡形状（图18d）。

接触半径 r 和高度 e 的数值解需要识别包含接触线的边界单元。由于会形成微小单元，即出现在主体相中的小型人工界面单元，因此接触线的识别（参见算法 1）可能颇具挑战性（参见 Mari´c 等人 [57]的讨论）。为解决这一问题，我们开发了一个 OpenFOAM 函数对象，用于检测并成功移除接触线识别过程中的微小单元（详见算法 2）。

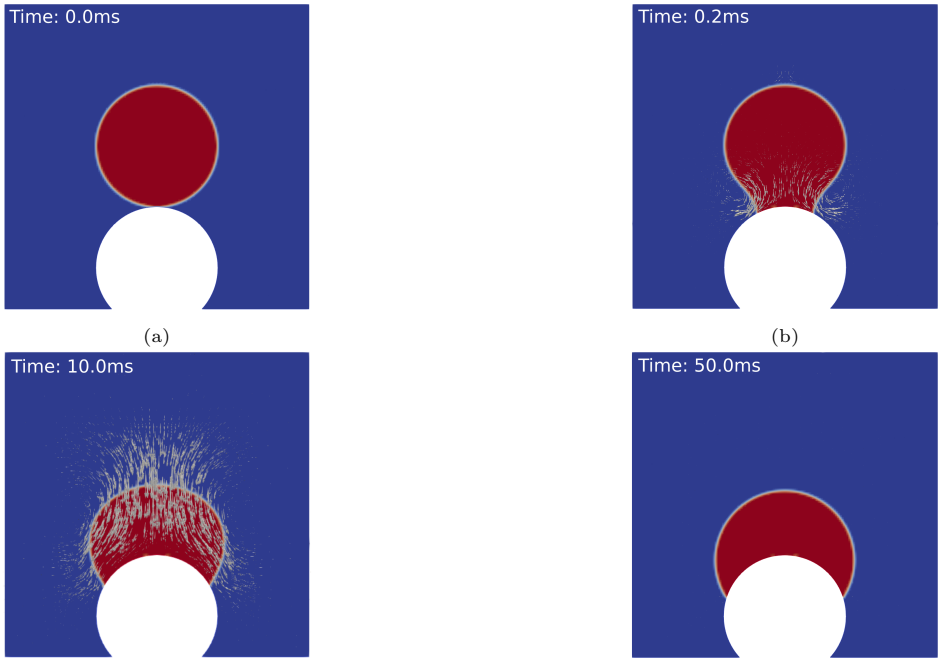


图18：球面上液滴在不同时间的铺展模拟结果。平衡接触角为 $\theta_e = 50°$。箭头表示速度场。

6.3. 液滴的几何特征

图 19 展示了在不同平衡接触角下，液滴在球面上铺展时无量纲平衡接触半径和高度的模拟结果。这些结果与公式 (40) 的参考解进行了比较，二者吻合极佳。图 20 使用 $\alpha = 0.5$等值线展示了不同接触角下的平衡液滴形状。比较结果表明，参考液滴形状与数值计算得到的液滴形状在定性上吻合良好。

算法 2 薄雾检测

过程 CHECKWISPS
  $alphaTol$ ▷ 界面单元的体积分数容差
  $wispTol$ ▷ 薄雾单元的体积分数容差
  对于所有 边界片 $\in$边界片 **执行**
    $normal$, $centre \leftarrow$ 界面法向量和中心
    对于所有 面i $\in$边界片[边界片] **执行**
      ownerCellId $\leftarrow$面 i 所属单元的单元索引
      如果 α[ownerCellId] $<$ (1.0 $-$ alphaTol) & α[ownerCellId] $>$ alphaTol **则**
        isAWisp $\leftarrow$ true ▷ 所有界面单元最初都标记为微小单元
        对于所有 邻接单元 $\in$ N_{facei} **执行** ▷ 遍历面 i 的邻接单元
          neiCellID $\leftarrow$面 i 的邻接单元的单元索引
          如果 α[neiCellID] $<$ (1.0 $-$ wispTol) & α[neiCellID] $>$ wispTol **则**
            isAWisp $\leftarrow$ false
            跳出
          结束 if
        结束 for
      结束 if
    结束 for
  结束 for
结束过程

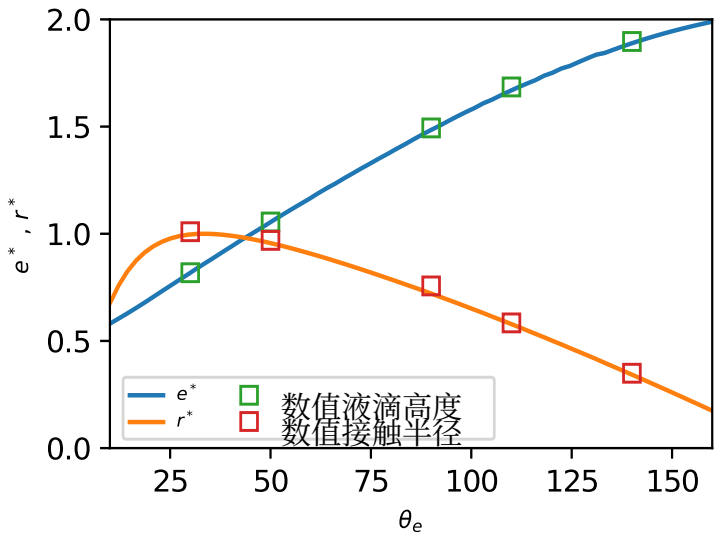


图19：球面上平衡液滴形状的无量纲几何特征：高度（—）、接触半径（—）、数值高度（ ）、数值接触半径（ ）。

该模拟 使用 plicRDF-isoAdvector 方法得到的模拟结果显示, ith

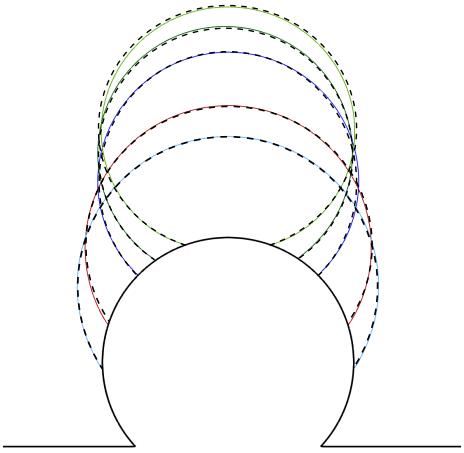


图20：平衡接触角分别为 $\theta_e = 30°$、$50°$、$90°$、$110°$和$140°$时的平衡液滴形状：几何参考解（--）（式（40））, 数值结果（—）。

液滴形状和几何特征与参考解吻合良好。不过，需要注意的是，液滴在球面上的对称铺展对数值噪声非常敏感。初始球形的微小扰动可能导致不同的平衡形状，使液滴向球面一侧倾斜。即便如此，液滴形状仍接近球冠，且仍满足静态接触角边界条件。

7. 二维毛细上升

7.1. 案例研究的定义

液体流经狭窄空间的过程称为毛细作用，文献对此已有深入研究（例如，参见 [58, 28, 29]）。这一过程可见于水从植物根部输送至植物体其他部位、液体在纸张等多孔介质中上升，以及从储层中开采石油等情形。

Qu´er´e 等人 [28], 以及 Fries 和 Dreyer [29] 基于 Bosanquet [59]提出的简化模型研究了毛细上升。后一个模型是一个常微分方程，源自对作用于液柱上的力进行经验建模。很容易证明 [28, 29]，Bosanquet 模型中的毛细上升动力学由单一的无量纲群 Ω 控制，其定义如下

$$\Omega = \sqrt{\frac{9\sigma\cos\theta\mu^2}{\rho^3 g^2 R^5}}. \tag{41}$$

此外，Qu´er´e 等人 [28] 指出，Bosanquet 模型会在临界值 $\Omega_c = 2$处发生流态转变。当 $\Omega > 2$ 时，液柱单调趋近稳态；而当 $\Omega < 2$时，则会出现上升高度振荡。低黏度液体的实验中已观察到这种振荡 [28]。值得注意的是，Gr¨unding 等人 [26] 在其研究中指出，Bosanquet 模型未考虑的 Navier滑移长度会显著影响上升动力学，并

影响瞬态阶段。事实上，滑移长度越小，上升高度振荡的阻尼就越强。这一发现促使研究者改进毛细上升的常微分方程建模，将接触线附近的流动考虑在内 [60, 61]。此外，研究表明 [62] ，如果存在其他耗散机制，Qu´er´e 等人 [28] 提出的临界条件可以推广。

在稳态下，液柱的高度可通过 Jurin 定律估算为

$$h_{\mathrm{Jurin,2D}} = \frac{\sigma \cos\theta}{R\rho g}, \tag{42}$$

其中， σ 为表面张力系数， R 为毛细管半径， ρ 为液体密度， g 为重力加速度， θ 为接触角。然而，方程（42）忽略了界面区域中的液体体积，因此高估了真实的稳态上升高度。Gr¨unding 等人 [26, 63] 根据界面区域中的液体体积（假设其形状为球冠）计算了修正后的毛细管稳态高度。修正公式如下：

$$h = h_{\mathrm{Jurin,2D}} - \frac{R}{2\cos\theta}\left(2 - \sin\theta - \frac{\sin^{-1}(\cos\theta)}{\cos\theta}\right). \tag{43}$$

本研究考虑二维情形，即液柱在两个平行平面之间上升的情形，如 [26]所示。我们针对无滑移（数值滑移）情形和采用已解析滑移长度的 Navier 滑移边界条件，分别进行了网格收敛性研究。正如 [26], 中所述，使用计算网格解析滑移长度对于实现接触线动力学的网格收敛至关重要。我们将 plicRDF-isoAdvector 方法与其他数值方法进行比较（模拟设置的详细信息见条目 4）：

1. OpenFOAM 求解器 interTrackFoam，一种任意拉格朗日-欧拉（ALE）方法 [64,65]。2. Free Surface 3D (FS3D)，一种自主开发的两相流求解器 [55], ，采用结构化几何 VOF 方法（简要说明见附录 C）。3. 基于 OpenFOAM 的代数 VOF 求解器 interFoam [3]。4. 基于扩展间断Galerkin方法 [67]的有界支撑谱求解器（BoSSS） [66], 。

7.1.1. 计算域

二维计算域的初始构型如图 21 所示。该计算域使用 OpenFOAM 的 blockMesh工具进行离散化，该工具在 x 和 y 方向上生成均匀笛卡尔网格。体积分数场初始化为位于毛细管底部的一个盒状区域，尺寸为 2R $\times$ 2R。模拟开始后，界面演化以满足接触角边界条件，随后上升。 [26] 中列出的物理参数旨在使 Ω 取不同数值，同时保持邦德数恒定（见表6）。

7.2. 网格收敛性研究

针对二维毛细上升，我们进行了网格收敛性研究，网格分辨率从每个毛细管直径 16 个网格单元到 256 个网格单元不等。本研究中，我们保持 $\Omega = 1$ 以及滑移长度 $\lambda = 0.1$ mm 不变

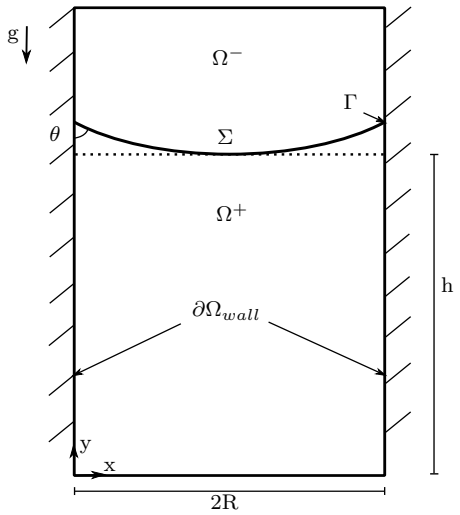
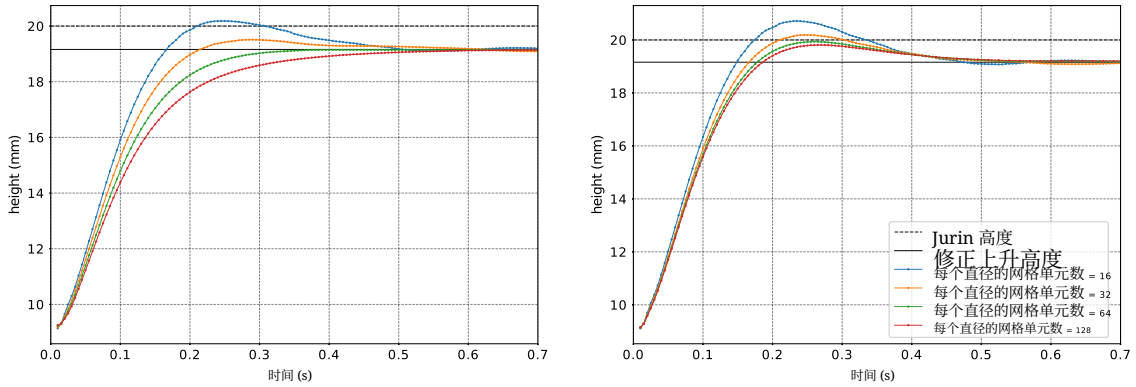


图21：示意　　图展示了2　　D毛细上升的初始构型。

Ω	R	ρ	μ	g	σ	θ_e	接触角 max	Bo
-	m	kgm^{-3}	Pa s	ms^{-2}	Nm^{-1}	°	-	-
0.1	0.005	1663.8	0.01	1.04	0.2	30	0.0033	0.217
0.5	0.005	133.0	0.01	6.51	0.1	30	0.015	0.217
1	0.005	83.1	0.01	4.17	0.04	30	0.029	0.217

表6：不同 Ω 的物理参数。

。由于此处选择了 $\Omega < \Omega_c$ ，根据 Quere 理论，我们预计毛细上升过程中会出现振荡。图22a所示结果采用无滑移边界条件获得。然而，由于该方法存在一定的隐式“数值滑移”，我们仍能观察到接触线运动。数值滑移与网格尺寸有关，因此结果中的动力学表现出对网格分辨率的强烈依赖。具体而言，随着网格分辨率提高，振荡受到的阻尼越来越强。这是符合预期的，因为众所周知，在无滑移条件下，接触区附近的黏性耗散具有不可积的奇异性。随着滑移长度减小、逐渐接近无滑移极限，数值解开始呈现极限问题不适定性的特征（Huh和Scriven悖论 [27]）。然而，对于滑移长度为正的 Navier 滑移，压力和黏性耗散均可积 [68]。因此，采用 Navier 滑移的模拟（见图 22b）表现出网格收敛性。尽管采用数值滑移和 Navier 滑移得到的解在上升动力学方面有所不同，但值得注意的是，两种情况下的稳态上升高度均与网格无关，并趋于修正后的稳态上升高度（由公式（43）给出）。



(a) 无滑移边界条件。

(b) Navier 滑移，滑移长度为 $\lambda = 0.1$ mm。

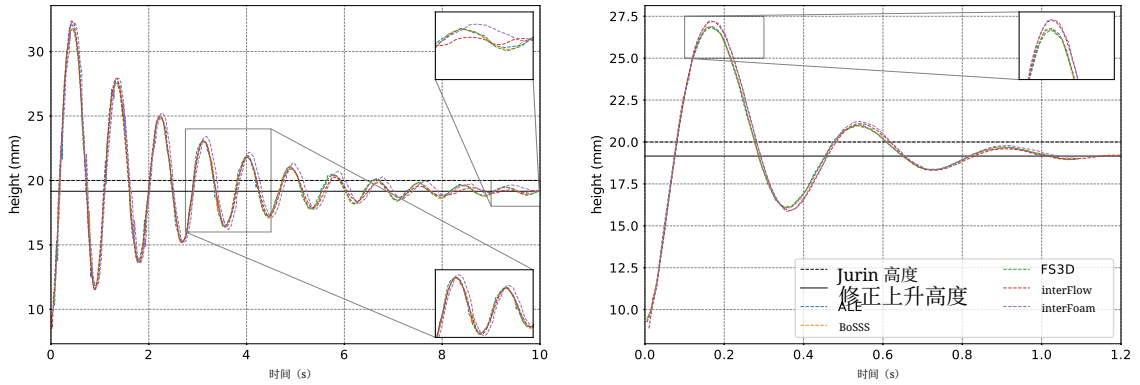
图 22：采用无滑移和 Navier 滑移边界条件进行的网格收敛性研究。非无量纲数 $\Omega = 1$ 和 $\theta_e = 30°$。

7.3. 无量纲参数Ω 对毛细上升的影响

图 23 展示了 $\Omega = 0.1$ 和 $\Omega = 0.5$的模拟结果，同时也给出了其他几种数值方法与 plicRDF-isoAdvector 方法的比较。由于此处选取的 Ω 数值低于临界值 $\Omega_c = 2$，根据 Quere 理论，我们预期毛细上升过程中会出现振荡。滑移长度设为 $\lambda = R/5 = 1$ mm。对于 $\Omega = 0.1$ （见图 23a），我们观察到明显的振荡，其振幅随时间减小，解渐近趋近于参考（校正后的）上升高度数值。值得注意的是，interFoam 方法和 plicRDF-isoAdvector 方法得到的振幅均高于其他方法得到的振荡振幅。这两种方法还存在轻微的相位偏移；对于 $\Omega = 0.1$，该偏移随时间不断增大。plicRDF-isoAdvector 方法的解比其他数值方法稍快衰减（见图 23a 和 23b）。对于 $\Omega = 0.5$，也能观察到类似的行为（见图 23b），但振荡次数较少，且模拟结果最终趋于公式（43）给出的静止高度。该案例研究表明，plicRDF-isoAdvector 方法能够捕捉 Quere 模型中的毛细上升动力学，所得稳态上升高度与校正后的毛细高度 43 吻合良好。

8. 总结与展望

我们通过五个案例研究验证并确认了 plicRDF-isoAdvector 方法在润湿过程中的适用性。第一项研究考察了界面对流，观察到收敛阶从一阶转变为二阶；与解析解相比，该方法在接触角演化的绝对误差方面优于边界 ELVIRA 方法 [22] 。第二项研究验证了平坦表面上的液滴铺展。除高度疏水或亲水的情况外，该方法在平衡状态下与几何解吻合极佳。我们观察到，系统的初始状态会显著影响其动力学。初始状态越接近平衡的系统，其结果越稳定



(a) Ω = 0.1。 (b) Ω = 0.5。

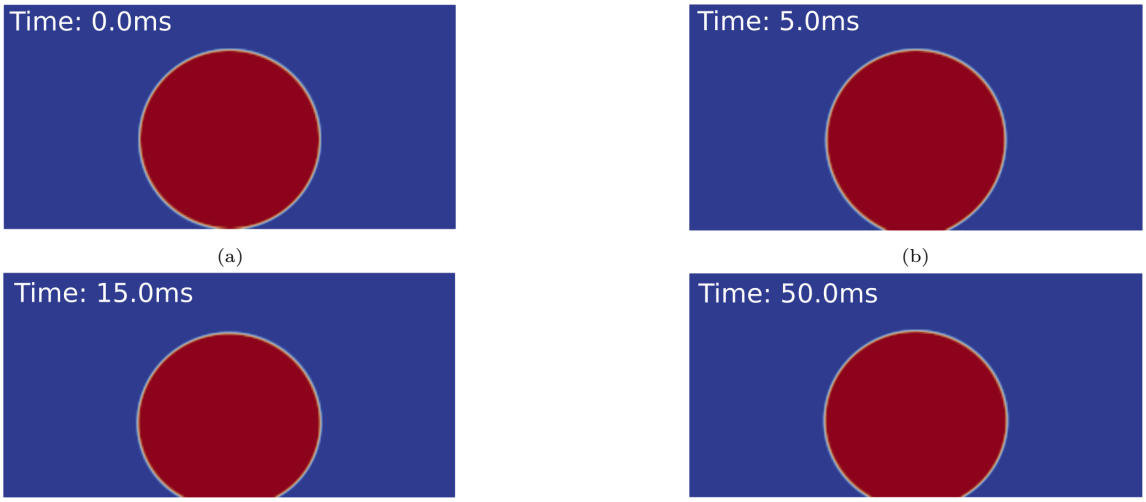
图 23：Ω研究（振荡状态）下毛细上升的数值结果。

。第三项案例研究使用 [24]的实验结果验证了该方法。研究表明，在接触角边界条件中采用未补偿的杨氏应力项，能够与这些实验结果非常吻合，且优于其他数值方法。第四项研究测试了该方法在球面上的液滴铺展情况，结果准确，但对数值噪声有一定敏感性。该案例研究为复杂基底上的润湿模拟奠定了基础，未来将用于验证液滴与复杂基底之间的相互作用 [69, 70] 。最后一项研究考察了二维毛细上升，稳态和接触线动力学均获得了网格收敛的结果。毛细管的动态振荡受无量纲参数 Ω 控制；值得注意的是，与其他数值方法的结果相比，plicRDF-isoAdvector 系统中的振荡更早衰减。案例设置、输入数据和后处理 Jupyter 笔记本均已在线公开 [17, 18], ，为评估润湿过程的数值方法提供了宝贵的起点。

正如我们所展示的，plicRDF-isoAdvector 方法能够有效模拟各类润湿问题。然而，在模拟接触角极小（亲水支撑面）或极大（疏水支撑面）时，仍面临挑战。plicRDF 重构通过对有符号距离值进行加权求和，间接考虑壁面处的接触角；其离散梯度决定了单元中心界面方向。此外，接触角对 PLIC 界面运动学运动的影响，也是通过单元中心的 PLIC 界面方向来体现的。因此，未来的开发应重新审视基于 RDF 的 PLIC 重构中对接触角进行加权贡献的方法。我们还建议在界面附近进行局部自适应网格细化，并使界面周围至少三层单元具有尽可能均匀的网格分辨率。尽管 plicRDF-isoAdvector 能够处理网格渐变，但界面穿过壁面附近非均匀渐变的网格时，会导致收敛阶降低。因此，针对接触线演化，需要一种非结构几何 VOF 界面重构方法，使其在壁面邻近单元中精确满足指定接触角，同时不会降低壁面邻近单元层以外区域的精度。

附录

A. 将液滴初始化为完整球体的液滴铺展



(a) (b) (c) (d)

图24：水平平面上液滴在不同时刻的铺展模拟结果。初始接触角和平衡接触角分别为 $\theta_0 \approx 180°$和 $\theta_e = 150°$。

B. 用于 [26] 二维毛细上升案例研究的计算设置 y

1. OpenFOAM 求解器 interTrackFoam，一种任意拉格朗日-欧拉（ALE）方法 [64,65]:

   计算域初始化为尺寸为2R×2R的盒状区域。模拟开始时，入口速度采用固定值的狄利克雷条件。界面演化为具有指定接触角 θ_0的弯月面形状。网格运动由拉普拉斯方程控制，并选用各向异性网格扩散系数，以便在网格运动过程中更好地分辨界面。界面形状演化为弯月面后，重新启动模拟，入口速度采用齐次诺伊曼边界条件，压力采用齐次狄利克雷边界条件。毛细管壁处采用Navier滑移边界条件。

2. 一个 内置两相流求解器 Free Surface 3D (FS3D)，采用几何VO F method:
   轴对称计算域采用均匀笛卡尔网格进行初始化，并在毛细管的中心轴处应用对称边界条件。体积分数场初始化为具有平衡接触角 θ_e 的球形界面。计算域壁面应用 Navier滑移边界条件。

3. 基于 OpenFOAM 的代数VOF求解器 interFoam [3]:
   与 FS3D 设置类似，interFoam 模拟采用毛细管中心处的对称边界条件。体积分数场初始化为毛细管底部的一个盒状区域。模拟从入口“关闭”状态开始，界面

演变为平衡接触角为 θ_e 的弯月面形状。毛细管壁处采用 Navier滑移边界条件。

4. 有界支撑谱求解器（BoSSS） [66], 基于扩展间断Galerkin方法 [67]: 采用 BoSSS 数值方法进行模拟时，在毛细管中心施加对称边界条件。计算域采用均匀等距网格离散。界面的初始化方式与 ALE 方法中所述相同。在计算域底部和顶部，分别施加流入和流出边界条件。在计算域壁面施加 Navier滑移边界条件。

C. FS3D——一种几何VOF方法

FS3D 求解器最初由 [55, 71] 开发，是一种几何流体体积法，用于在结构化笛卡尔网格上求解不可压缩两相纳维–斯托克斯方程。与 plicRDF-isoAdvector 方法一样，该方法采用了 [72] 提出的连续表面力（CSF）公式中的单场公式。[54, 73]对该方法进行了扩展，使其能够描述移动接触线。界面的平均曲率使用[74]提出的高度函数方法计算。按照 [75], 提出的方法，高度函数方法在接触线区域经过调整，以应用接触角边界条件。由于采用笛卡尔网格结构，该方法计算效率较高，但只能处理相对简单的几何形状，例如平坦表面，或具有条纹等简单结构的表面 [76]。

D. Flo plicRDF-isoAdvector 方法求解算法流程图

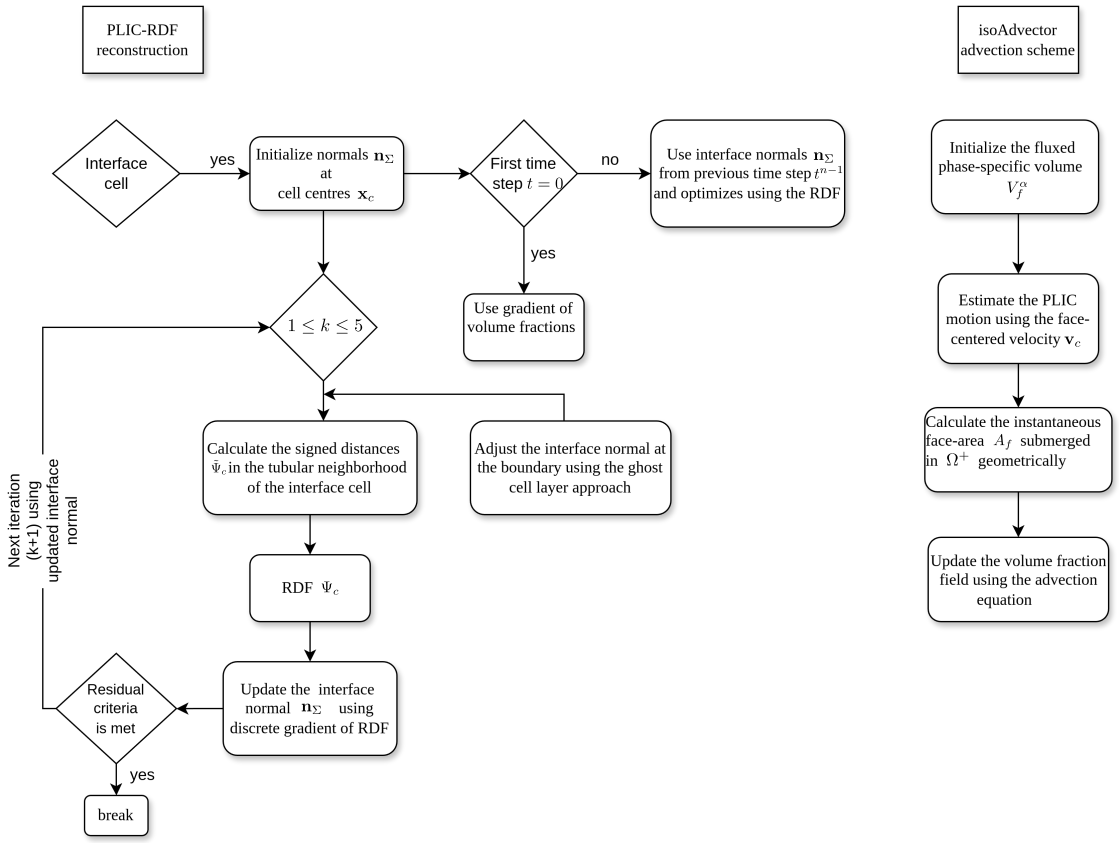


图25：plicRDF-isoAdvector 方法的求解算法流程图。plicRDF重构格式重构有符号距离函数 RDF，并通过迭代不断改进界面法向量的方向。随后，isoAdvector格式通过几何计算面面积 A_f（其浸没于相 Ω^+ 中），更新控制体积 Ω 的每个面上的相特定体积通量。

致谢

我们感谢德国研究基金会（DFG）通过协同研究中心 1194（项目编号265191195）提供的经费支持。

谨此致谢达姆施塔特工业大学利希滕贝格高性能集群所提供的高性能计算资源。

参考解

[1] M. Marengo、J. D. Coninck（编），《表面润湿性对相变的影响》，Springer International Publishing，2022年。doi:10.1007/978-3-030-82992-6。[2] T. Mari´c、D. B. Kothe、D. Bothe，《非结构化非分裂几何流体体积法——综述》，《计算物理学杂志》420（2020）109695。doi:https://doi.org/10. 1016/j.jcp.2020.109695。[3]OpenCFD Ltd.，《OpenFOAM：用户指南 v2006》，2006年。https://openfoam.com/documentation/guides/latest/doc/，最后访问于2024年5月9日。[4] S. S. Deshpande、L. Anumolu、M. F. Trujillo，《两相流求解器 interFoam 性能评估》，《计算科学与发现》5（2012）014016。doi:10.1088/ 1749-4699/5/1/014016。[5] J. Roenby、H. Bredmose、H. J asak，《一种尖锐界面平流计算方法》，《英国皇家学会开放科学》3（2016）160405。doi:https://doi.org/10.1098/rsos.160405。[6] H. Scheufler、J. Roenby，《一般网格上基于体积分数数据的准确高效表面重构》，《计算物理学杂志》383（2019）1–23。doi:https://doi.org/10.1016/j.jcp.2019.01.009。[7] L. Gamet、M. Scala、J. Roenby、H. Scheufler、J.-L. Pierson，《使用单气泡基准测试验证流体体积法 OpenFOAM® isoAdvector 求解器》，《Computers & Fluids》213（2020）104722。doi:https://doi.org/10.1016/j.compfluid.2020.104722。[8] S. Popinet，《用于 Serre–Green–Naghdi方程的四叉树自适应多重网格求解器》，《计算物理学杂志》302（2015）336–358。doi:https://doi.org/10.1016/j.jcp. 2015.09.009。[9] S. Osher、J. A. Sethian，《以依赖曲率的速度传播的前沿：基于 Hamilton–Jacobi公式的算法》，《计算物理学杂志》79（1988）12–49。doi:https://doi.org/10.1016/0021-9991(88)90002-2。[10] S. Turek，《不可压缩流动问题的高效求解器：算法与计算方法》，第6卷，Springer Science & Business Media，1999年。[11] N. Parolini、E. Burman，《一种用于黏性自由表面流的有限元水平集方法》，载于：《意大利应用与工业数学》，世界科技出版公司，2005年，第416–427页。doi:https: //doi.org/10.1142/9789812701817_0038。[12] V. John、G. Matthies，《MooNMD——一个基于映射有限元方法的程序包》，《科学计算与可视化》6（2004）163–170。doi:https://doi.org/10.1007/s00791-003-0120-1。[13] S. Siriano、N. Balc´azar、A. Tassone、J. Rigola、G. Caruso，《使用 interIsoFoam 对高密度比气泡运动进行数值模拟》，《Fluids》7（2022）152。doi:https://doi.org/ 10.3390/fluids7050152。

[14] A. Lippert, T. Tolle, A. D¨orr, T. Maric, 《表面张力驱动的不可压缩两相流基准测试》, 2022年。arXiv:2212.02904。[15]TwoPhaseFlow-of2312，2023年。网址：https://github.com/tmaric/TwoPhaseFlow/tree/ of2312。[16] P. Giefer, A. Kyrloglou, U. Fritsching, 《润湿性对微毛细管中界面变形和液滴破碎的影响》, 《流体物理》35（2023）。[17] Asghar, M. H. 和 Mari´c, T., 《plicRDF-isoAdvector 润湿过程基准测试》, https: // github.com/CRC-1194/b01-wetting-benchmark/releases/tag/release1.0，2024年。网址：https://github.com/CRC-1194/b01-wetting-benchmark/releases/tag/release1.0，GitHub 仓库，1.0版。[18]M. H. Asghar, M. Fricke, D. Bothe, T. Mari´c, 《用于润湿问题的 plicrdf-isoadvector 非结构化流体体积法（VOF）的验证与确认——输入数据》, 2024-05-24。网址：https://tudatalib.ulb.tu-darmstadt.de/handle/tudatalib/3621.5。doi:10.48328/tudatalib-982.5。[19]M. H. Asghar, M. Fricke, D. Bothe, T. Maric, 《使用 plicrdf-isoadvector 非结构化流体体积法（VOF）的数值润湿模拟——Jupyter 笔记本、CSV 文件、次级数据、参数变化文件》, https://www.codeocean.com/，2024年。doi:10.24433/CO.1507307.v1。[20] T. Kluyver, B. Ragan-Kelley, F. P´erez, B. Granger, M. Bussonnier, J. Frederic, K. Kelley, J. Hamrick, J. Grout, S. Corlay, P. Ivanov, D. Avila, S. Abdalla, C. Willing, Jupyter 开发团队, 《Jupyter 笔记本——可复现计算工作流的出版格式》, 载于：F. Loizides, B. Scmidt（编）, 《学术出版中的定位与权力：参与者、代理人与议程》, IOS Press, 荷兰，2016年，第87–90页。网址：https://eprints.soton.ac. uk/403913/。[21]M. H. Asghar, M. Fricke, D. Bothe, T. Mari´c, 《数值润湿基准测试——使用抛物线拟合曲率模型推进 plicrdf-isoadvector 非结构化流体体积法（VOF）——Jupyter 笔记本、CSV 文件、次级数据、参数变化文件》, 2023-02-02。网址：https://tudatalib.ulb.tu-darmstadt.de/handle/tudatalib/3622.7。doi:10.48328/tudatalib-983.7。[22] M. Fricke, T. Mari´c, D. Bothe, 《使用几何流体体积法进行接触线平流》, 《计算物理学杂志》407（2020）109221。doi:https://doi.org/10.1016/j.jcp.2019.109221。[23] J.-B. Dupont, D. Legendre, 《考虑接触角滞后的静止和滑动液滴数值模拟》, 《计算物理学杂志》229（2010）2453–2478。doi:https://doi.org/10.1016/j.jcp.2009.07.034。[24] B. Lavi, A. Marmur, 《指数幂律：部分润湿动力学与动态接触角》, 《胶体与表面 A：物理化学与工程方面》250（2004）409–414。网址：https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0927775704004777。doi:https://doi.org/10.1016/j.colsurfa.2004.04.079，谨以此文纪念《胶体与表面 A》出版第250卷及国际胶体与界面科学家协会（IACIS）成立25周年。

[25] H. Patel, S. Das, J. Kuipers, J. Padding, E. Peters, 《一种用于在复杂几何中模拟具有接触线动力学的三维多相流的流体体积法与浸入边界法耦合方法》, Chemical Engineering Science 166（2017）28–41。doi:https://doi.org/10.1016/ j.ces.2017.03.012。[26] D. Gr¨unding, M. Smuda, T. Antritter, M. Fricke, D. Rettenmaier, F. Kummer, P. Stephan, H. Marschall, D. Bothe, 《采用直接数值模拟对瞬态毛细上升进行比较研究》, 《应用数学建模》86（2020）142–165。doi:https://doi.org/10. 1016/j.apm.2020.04.020。[27] C. Huh, L. E. Scriven, 《固体/液体/流体接触线稳定运动的流体动力学模型》, 《胶体与界面科学杂志》35（1971）85–101。doi:https://doi.org/10. 1016/0021-9797(71)90188-3。[28] D. Qu´er´e, ´E. Rapha¨el, J.-Y. Ollitrault, 《毛细管中的回弹》, Langmuir 15（1999）3679–3682。doi:https://doi.org/10.1021/la9801615。[29] N. Fries, M. Dreyer, 《毛细上升的无量纲标度方法》, 《胶体与界面科学杂志》338（2009）514–518。doi:https://doi.org/10.1016/j.jcis.2009.06.036。[30]OpenFOAM.com，OpenFOAM-v2312，2023年。网址：https://develop.openfoam.com/Development/openfoam/-/tree/OpenFOAM-v2312。[31]Bernhard Gschaider，Contrib/PyFoam，2005年。https://openfoamwiki.net/index.php/ Contrib/PyFoam，最后访问于2020年10月19日。[32] T. Tolle, D. Gr¨unding, D. Bothe, T. Mari´c, 《triSurfaceImmersion：从浸入非结构网格的三角剖分表面计算体积分数和有符号距离》, Computer Physics Communications 273（2022）108249。doi:https://doi.org/10.1016/j.cpc. 2021.108249。[33]Franjo Juretic，integration-cfmesh，2021年。https://develop.openfoam.com/Community/integration-cfmesh/-/commit/f362ee65334e08056abdabab45e588503553e0ef，build = 14aeaf8dab-20211220，最后访问于2022-10-19。[34] W. M. J¨urgen Riegel, Y. van Havre, FreeCAD：一款三维参数化建模软件，2022年。网址：https: //www.freecadweb.org/。[35] D. L. Youngs, 《具有大幅流体变形的时变多材料流》, 《流体动力学数值方法》（1982年）。网址：https://cir.nii.ac.jp/crid/1571417126191472512。[36] R. Scardovelli, S. Zaleski, 《采用最小二乘拟合进行界面重构及分步欧拉–拉格朗日平流》, 《国际流体数值方法杂志》41（2003）251–274。doi:https://doi.org/10.1002/fld.431。[37]T. Tolle, D. Bothe, T. Mari´c, 《SAAMPLE：一种用于多相压力关联方程的分离式精度驱动算法》, Computers & Fluids 200（2020）104450。doi:https: //doi.org/10.1016/j.compfluid.2020.104450。[38] M. Renardy, Y. Renardy, J. Li, 《使用流体体积法数值模拟移动接触线问题》, 《计算物理学杂志》171（2001）243–263。doi:https: //doi.org/10.1006/jcph.2001.6785。

[39] H. Scheufler, J. Roenby，Twophaseflow：用于开发 OpenFOAM 两相流求解器的框架，《OpenFOAM® Journal》3（2023年）200–224。网址：https://journal.openfoam.com/index.php/ofj/article/view/80.[40]M. H. Asghar, M. Fricke, D. Bothe, T. Mari´c, 《数值润湿基准测试——采用抛物线拟合曲率模型改进 plicrdf-isoadvector 非结构化流体体积法（vof）》，Jupyter 笔记本、CSV 文件、次级数据、参数变化文件，2023-02-02。网址：https://tudatalib.ulb.tu-darmstadt.de/handle/tudatalib/3622.5。doi:10.48328/tudatalib-983.5.[41] M. H. Asghar, M. Fricke, D. Bothe, T. Mari´c, 《数值润湿基准测试——采用 RDF 曲率模型改进 plicRDF-isoAdvector 非结构化流体体积法（VOF）》，Jupyter 笔记本、CSV 文件、次级数据、参数变化文件，2023年。网址：https://tudatalib.ulb.tu-darmstadt.de/handle/tudatalib/3730.2。doi:10.48328/tudatalib-1069.2.[42]M. H. Asghar, M. Fricke, D. Bothe, T. Mari´c, 《数值润湿基准测试——采用高度函数曲率模型改进 plicrdf-isoadvector 非结构化流体体积法（vof）》，Jupyter 笔记本、CSV 文件、次级数据、参数变化文件，2023-02-02。网址：https://tudatalib.ulb.tu-darmstadt.de/handle/tudatalib/3729.3。doi:10.48328/tudatalib-1068.3.[43] M. Fricke, M. K¨ohne, D. Bothe，动态接触角的运动学演化方程及其若干推论，《物理学D：非线性现象》394（2019年）26–43。doi:https: // doi.org/10.1016/j.physd.2019.01.008.[44] M. Fricke, M. K¨ohne, D. Bothe，论接触线运动的运动学，PAMM 18（2018年）e201800451。doi:https://doi.org/10.1002/pamm.201800451.[45] M. Fricke, B. Fickel, M. Hartmann, D. Gr¨unding, M. Biesalski, D. Bothe，一种基于几何的铺展液滴模型：应用于硅晶圆及可溶胀聚合物刷膜上的液滴，arXiv 预印本 arXiv:2003.04914（2020年）。doi:10.48550/ARXIV.2003.04914.[46] S. Afkhami, S. Zaleski, M. Bussmann，一种用于在 VOF 模拟中施加动态接触角的网格依赖模型，《计算物理学杂志》228（2009年）5370–5389。doi:https://doi.org/10.1016/j.jcp.2009.04.027.[47] V. Khatavkar, P. Anderson, H. Meijer，采用弥散界面模型模拟部分润湿状态下液滴的毛细铺展，Journal of Fluid Mechanics 572（2007年）367–387。doi:https://doi.org/10.1017/S0022112006003533.[48] W. Villanueva, G. Amberg，若干典型的毛细驱动流，《国际多相流杂志》32（2006年）1072–1086。doi:https://doi.org/10.1016/j.ijmultiphaseflow. 2006.05.003.[49]Kitware, Inc，洛斯阿拉莫斯国家实验室，ParaView-v5.9，2021年。https://www. paraview.org/documentation/，最后访问日期：2022-10-19。[50] R. Cox，液体在固体表面上的铺展动力学。第一部分：黏性流，Journal of fluid mechanics 168（1986年）169–194。

[51]Scheufler, Henning 和 Roenby, Johan，isoAdvection 格式，2024年。网址：https://www. openfoam.com/documentation/guides/latest/api/isoAdvection_8C_source.html.[52] D. Duvivier, D. Seveno, R. Rioboo, T. D. Blake, J. De Coninck，黏度在动态润湿分子动力学理论中作用的实验证据，Langmuir 27（2011年）13015–13021。网址：https://doi.org/10.1021/la202836q。doi:10.1021/la202836q，pMID: 21919445。[53] T. D. Blake, J.-C. Fernandez-Toledano, G. Doyen, J. De Coninck，强制润湿与流体动力学助推，《流体物理》27（2015年）112101。网址：https://doi.org/10.1063/1. 4934703。doi:10.1063/1.4934703。[54] A. C. Lippert，《两相流中热毛细驱动运动的直接数值模拟》，博士论文，达姆施塔特工业大学，达姆施塔特，2016年。网址：http: // tuprints.ulb.tu-darmstadt.de/5817/.[55]M. Rieber，《两相流中自由界面动力学的数值建模》，VDI 进展报告 / 7，VDI 出版社，2004年。网址：https://books.google. de/books?id=1tWKAgAACAAJ.[56] A. Benkenida, J. Magnaudet，一种无需重构界面的两相流模拟方法，《法国科学院报告：科学系列 IIB——力学、物理、天文学》328（2000年）。doi:10.1016/S1287-4620(00)88412-4.[57] T. Mari´c, H. Marschall, D. Bothe，一种改进的非分裂面-顶点通量型体积分数法，《计算物理学杂志》371（2018年）967–993。doi:https://doi.org/10.1016/j.jcp. 2018.03.048.[58] E. W. Washburn，毛细管流动的动力学，《物理评论》17（1921年）273–283。doi:10.1103/PhysRev.17.273.[59] C. H. Bosanquet，论液体流入毛细管，《伦敦、爱丁堡和都柏林哲学杂志与科学期刊》45（1923年）525–531。doi:https://doi. org/10.1080/14786442308634144.[60] J. Delannoy, S. Lafon, Y. Koga, ´E. Reyssat, D. Qu´er´e，黏度在毛细上升中的双重作用，《软物质》15（2019年）2757–2761。[61] M. Fricke, S. Raju, E. A. Ouro-Koura, O. Kozymka, J. D. Coninck, Z. Tukovic, T. Maric, D. Bothe，利用降复杂度模型衔接毛细上升动力学的多个尺度，2023年。arXiv:2311.11947。[62] M. Fricke, E. A. Ouro-Koura, S. Raju, R. von Klitzing, J. De Coninck, D. Bothe，毛细上升动力学的解析研究：临界条件与隐藏振荡，2023年。网址：https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S016727892300249X。doi:https://doi.org/10.1016/j.physd.2023.133895。[63] D. Gr¨unding，毛细上升问题的改进模型，《国际多相流杂志》128（2020年）103210。doi:https://doi.org/10.1016/j.ijmultiphaseflow. 2020.103210。

[64] Z. Tukovic, H. Jasak，采用移动网格有限体积界面追踪方法模拟表面张力主导的界面流动，Computers & Fluids 55 (2012) 70–84。doi:10.1016/ j.compfluid.2011.11.003。[65]D. Gr¨ unding，《用于润湿过程直接数值模拟的任意拉格朗日-欧拉方法》，博士论文，达姆施塔特工业大学，达姆施塔特，2020年。URL: http://tuprints.ulb.tu-darmstadt.de/11442/。doi:https://doi.org/ 10.25534/tuprints-00011442。[66] F. Kummer，《用于不可压缩流体动力学的 BoSSS 间断伽辽金求解器及其向奇异方程的扩展》，博士论文，达姆施塔特工业大学，达姆施塔特，2012。URL: http://tuprints.ulb.tu-darmstadt.de/2889/。[67] F. Kummer，适用于两相流的扩展间断伽辽金方法：空间离散化，International Journal for Numerical Methods in Engineering 109 (2017) 259–289。

[68] C. Huh、S. G. Mason，《毛细管中液体弯月面的稳态运动》，Journal of Fluid Mechanics 81 (1977) 401–419。doi:10.1017/S0022112077002134。

[69] S. Shumaly、F. Darvish、X. Li、A. Saal、C. Hinduja、W. Steffen、O. Kukharenko、H.-J. Butt、R. Berger，《利用深度学习分析滑动液滴》，Langmuir 39 (2023年) 1111–1122。

[70]S. Mitra、M. J. Sathe、E. Doroodchi、R. Utikar、M. K. Shah、V. Pareek、J. B. Joshi、G. M. Evans，《球形颗粒上的液滴撞击动力学》，Chemical Engineering Sci- ence 100 (2013) 105–119。URL: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/ S000925091300050X。doi:https://doi.org/10.1016/j.ces.2013.01.037，第11届气液及气液固反应器工程国际会议。

[71]M. Rieber、A. Frohn，《飞溅机制的数值研究》，《国际热与流体流动杂志》20（1999）455–461。网址：https: //www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0142727X99000338。doi：https://doi. org/10.1016/S0142-727X(99)00033-8。

[72] J. Brackbill、D. Kothe、C. Zemach，《一种用于模拟表面张力的连续介质方法》，《计算物理学杂志》100（1992年）335–354。网址：https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/002199919290240Y。doi：https://doi.org/10.1016/0021-9991(92)90240-Y。[73] M. Fricke，《动态润湿的数学建模与基于流体体积法的模拟》，博士论文，达姆施塔特工业大学，达姆施塔特，2021年。网址：http://tuprints. ulb.tu-darmstadt.de/14274/。doi：https://doi.org/10.12921/tuprints-00014274。[74]S. Popinet，《用于表面张力驱动界面流动的精确自适应求解器》，《计算物理学杂志》228（2009年）5838–5866。网址：https: //www.sciencedirect.com/science/article/pii/S002199910900240X。doi：https://doi.org/10.1016/j.jcp.2009.04.042。[75] S. Afkhami、M. Bussmann，《在二维流体体积法模拟中应用接触角的高度函数》，《国际流体数值方法杂志》57（2008年）453–472。

[76] M. Hartmann、M. Fricke、L. Weimar、D. Gr¨unding、T. Mari´c、D. Bothe、S. Hardt, 《疏水条纹上毛细管桥的断裂动力学》, 《国际多相流杂志》140（2021年）103582。网址：https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/ S0301932221000306。doi：https://doi.org/10.1016/j.ijmultiphaseflow.2021.103582。