arXiv:2603.04270v1 [physics.flu-dyn] 4 Mar 2026

用于可压缩多相流的网格无关流体体积法：界面锐化与表面张力

Joseph J. Marziale[a]、Jason Sun[a]、David Salac[a]、James Chen[a]

[a]纽约州立大学布法罗分校机械与航空航天工程系，美国纽约州布法罗市，邮编 *14260*

摘要

有限体积法（FVM）离散多相流时产生的界面扩散，使得界面锐化机制成为必要。针对结构化四边形网格的此类方法已有充分记载，但各种工程应用要求网格设计适应所模拟物理系统的不规则几何形状。因此，本研究将界面锐化视为一种反扩散体积体力，其计算过程可推广至任意构造网格。该力的大小在单元中心处推导，取决于局部可压缩流动特性以及单元邻域的几何形状。流动模型采用基于 AUSM+up 的通量计算方法，并对每种流体施加刚化状态方程，以封闭线性方程组并求得辅助变量。验证测试表明，结果与杨-拉普拉斯条件吻合良好，即界面收敛至压力跃变与界面力平衡所对应的解析解。进一步的结果表明，表面张力与界面锐化的共同作用能够使初始形状曲率变化剧烈的界面恢复为圆形。最后，剪切驱动液滴断裂的结果与相关文献在不同韦伯-奥内佐格数组合下给出的液滴形状吻合良好。

关键词：锐界面，可压缩流动，网格无关

电子邮箱地址：chenjm@buffalo.edu (James Chen)

1. 引言

微分方程（如纳维-斯托克斯方程）的离散化会产生人为的数值扩散。对于多相流，这种扩散会导致界面随时间发生弥散。然而，精确的界面动力学决定了毛细效应的强度、传热速率以及相变 [1, 2, 3, 4, 5, 6]。因此，在多相流中保持界面至关重要。解决界面弥散的一种可能方案是采用加密网格，因为导数的数值近似具有更小的误差。然而，更细的网格会使数值系统包含更多的点，从而增加求解时间 [7]。自适应网格加密可用于降低不必要的计算成本，动态加密界面附近区域，同时粗化远场 [8, 9, 10, 11, 12]。这可减少部分计算开销，但代价是插值误差以及加密算法的复杂性。水平集方法及其他界面追踪算法更易于实现，但它们与受物理约束的流动系统解耦，若不借助额外的基于体积分数法或基于标记粒子的质量修正过程，便无法满足质量守恒[13, 14, 15, 16]。一种既简单又守恒的替代方案是界面锐化格式的近期发展，这类格式近年来日益流行 [17, 18, 19, 20]。界面锐化格式可解析两种不互溶流体的界面，否则这些流体会表现出人为的数值扩散。采用界面锐化格式的工程应用实例包括海洋与海岸波浪破碎 [21]；水下爆炸 [22]；火箭推进 [23]；直写式墨水打印 [24, 25, 26]；超燃冲压发动机燃料点火 [27]；沸腾、蒸发和凝结的液汽动力学 [28, 29]；以及液液油萃取 [30]。

Anderson [31],回顾了几种界面锐化方法，其中一种广受欢迎的方法是在界面对流方程中引入数值人工锐化项 [32, 33, 34, 35]。通常，界面速度被分解为切向分量和法向分量，并对法向分量进行修正，以引起界面压缩 [36]。将法向速度建模为与曲率成正比的做法最早见于 Osher 和 Sethian 的研究 [37, 38]。在此基础上，Folch 和 Casademunt 提出了一种反项方法，以抑制由曲率驱动的运动 [39]。为控制锐化项收敛至的界面厚度，Boettinger 等人 [40] 将界面表示为

具有过渡区长度参数的双曲正切核。这项工作最终发展为 Chiu 和 Lin 提出的一种负扩散方法 [41]，该方法既守恒，又只需计算二阶导数。近期，Jain 将该方法应用于二阶结构化四边形离散格式，并通过误差分析对其进行了评估 [42]。此外，Mirjalili 等人阐明了该方法的有界性区域和稳定性区域 [43]。

诸如此处讨论的界面锐化格式，通常采用均匀四边形网格进行离散。然而，许多应用本身具有复杂的几何形状，因此人们希望能够在流体系统上叠加任意网格。飞机周围的流动与机翼和机身的精细曲率及角度密切相关 [44, 45]。石油、水和气体在石油储层中的多相流涉及不规则的孔隙形状和裂隙岩层 [46]。破碎波的气水界面与海岸礁石、海岸线及其他自然地形动态相互作用 [47, 48]。在所有这类研究中，只有让网格贴合这些局部关注区域，才能最好地捕捉流体行为。

近年来，为了适用于任意网格而对界面锐化方法进行推广、从而满足这些应用需求的相关研究逐渐增多[49, 50, 51] 但从历史上看，这类方法更难实现，因此鲜有研究。早期的几何VOF方法（包括 PLIC）通过在结构化单元内计算平面子体积，并将其作为界面位置的重构近似，实现了锐界面追踪 [52, 53]。对于被平面切割的任意多面体，其子体积的通用求解方法，以及非结构化网格单元可能存在凹面的情况，仍是当前的研究课题 [54, 55, 56]。已有多项研究将相关方法推广至任意多面体 [57, 58]。近期已有研究发表了在任意网格上进行 PLIC重构的应用 [59, 60]。THINC 等代数方法应运而生，旨在克服这些局限；这类方法以体积分数的解析剖面取代几何重构，并可对其在单元面上的积分进行计算 [61]。最初的 THINC 公式针对结构化四边形网格设计，而 Xie 和 Xiao 随后提出的 THINC/QQ 扩展方法，则在任意单元结构的各个面上采用高斯求积，将面通量近似为加权和，从而实现非结构化网格适配 [62, 63, 64]。该方法成功地在非结构网格上锐化了界面，但与高阶重构问题中的常见情况一样，可能会在陡峭梯度附近引入伪振荡。为解决这一问题，Wakimura

等人会在每个单元内同时计算 THINC/QQ 和 MUSCL 型重构，并选择边界变差较小的结果 [65]。然而，每个时间步都要对每个面进行多点求积计算，带来了额外的计算开销。相比之下，Kim 等人近期提出的代数方法使用逻辑斯蒂 sigmoid 函数作为单元面处体积分数场的斜率限制器，以增大其梯度；该方法实现起来简单得多，但牺牲了一定的精度 [63, 66, 67]。Kim 的格式和 Wakimura 的格式均以面中心通量修正项的形式运作，并需要在单元面上计算高阶界面投影，因此其效果可能会因局部网格质量而异。相比之下，单元中心格式无需此类投影，但相关研究较少，尤其是在不对速度场作不可压缩性假设的情况下。

本研究旨在开发一种模型，用于计算多相可压缩流中的界面锐化和表面张力项，并使其适用于任意构造的单元中心分布。本文其余部分的结构如下：第2 节推导并离散化界面锐化和表面张力项，并阐述它们与多相守恒系统之间的关系。第3节通过一系列测试算例验证所提出的模型，随后基于表征该流动的韦伯-奥内佐格数组合，分析液滴形状物理。第4 节总结本文。

2. 数学模型

本节介绍包含界面锐化和表面张力项的可压缩多相流系统（第2.1节），并说明如何针对任意构造的控制体邻域离散化这些项（第2.2节）。此外，还将阐述模型如何通过流体状态方程封闭守恒系统（第2.3节），以及如何计算通量（第2.4节）。

2.1. 多相流系统

令 ρ、$\vec{u}$、e、ϕ 分别表示密度、速度、内能和体积分数；上标 $^{(I)}$ $^{(II)}$ 表示两个相之一的量；令 $\phi = \phi^{(I)} = 1 - \phi^{(II)}$；并令 $\vec{S}$ 为源项向量。考虑多相欧拉系统典型有限离散所伴随的数值扩散，其中两个相之一的分密度（$\rho^{(I)}\phi$），

每单位体积的质量密度（ρ）、动量密度（$\rho\vec{u}$）和能量密度（ρe）守恒:

$$\frac{\partial}{\partial t}\begin{Bmatrix}\rho^{(I)}\phi\\ \rho\\ \rho\vec{u}\\ \rho e\end{Bmatrix}+\nabla\cdot\begin{Bmatrix}\rho^{(I)}\phi\vec{u}\\ \rho\vec{u}\\ \rho\vec{u}\otimes\vec{u}+p\mathbf{I}-\boldsymbol{\tau}\\ \rho H\vec{u}-\boldsymbol{\tau}\cdot\vec{u}\end{Bmatrix}=\vec{S}, \tag{1}$$

其中 t 表示时间，$\mathbf{I}$ 为单位矩阵，$\boldsymbol{\tau}=\mu(\nabla\vec{u}+\nabla\vec{u}^T)-\frac{2}{3}\mu(\nabla\cdot\vec{u})\mathbf{I}$ 为流体应力张量，$\mu=\phi\mu^{(I)}+(1-\phi)\mu^{(II)}$ 为体积分数加权混合黏度系数，且 $\rho H=\rho e+p$。将式（1）在有限单元体积 V 内转换为弱形式，并截断通量泰勒级数展开中的高阶项，会产生数值扩散。具体而言，部分密度方程的截断误差会导致体积分数界面模糊。对线性方程组中的第一个方程关于 V 积分，并应用散度定理，得到

$$\int_V\Big[\frac{\partial}{\partial t}(\rho^{(I)}\phi)+\nabla\cdot(\rho^{(I)}\phi\vec{u})\Big]dV=\frac{\partial}{\partial t}\int_V\rho^{(I)}\phi dV+\oint_S(\rho^{(I)}\phi\vec{u})\cdot\vec{n}dS=0, \tag{2}$$

其中，S 表示单元体积的表面，$\vec{n}$ 为表面外法向量。通量项 $\rho^{(I)}\phi\vec{u}:=\vec{P}$ 离散为单元体积各个面的贡献之和，因此

$$\oint_S\vec{P}\cdot\vec{n}dS=\sum_{f\in V}\vec{P}^{|f}\cdot\vec{n}_f \tag{3}$$

其中，f 表示一个面，$\vec{n}_f$ 表示面面积向量。从这里开始，有限体积法会引入两类误差。

（i）首先，将场变量从单元中心插值到各个面上。通量在单元形心 z 处的泰勒级数展开为

$$\vec{P}^{|f}=\vec{P}^{|z}+\nabla\vec{P}^{|z}\cdot\vec{\mathcal{X}}+\frac{1}{2}H[\vec{P}^{|z}]:\Big[\vec{\mathcal{X}}\otimes\vec{\mathcal{X}}\Big]+\sum_{n=3}^{\infty}\frac{1}{n!}\frac{\partial^n\vec{P}^{|z}}{\partial x_{\alpha_1}\partial x_{\alpha_2}\ \dots\ \partial x_{\alpha_n}}\mathcal{X}_{\alpha_1}\mathcal{X}_{\alpha_2}\dots\mathcal{X}_{\alpha_n} \tag{4}$$

其中 $\vec{\mathcal{X}}:=\vec{x}^{|f}-\vec{x}^{|z}$，即连接面与质心的向量；$H$ 是海森函数；α_i 是应用爱因斯坦求和的哑指标

。通常，对面进行线性插值，使得 $\vec{P}^{|f}_{lin} = \vec{P}^{|z} + \nabla\vec{P}^{|z} \cdot \vec{\mathcal{X}}$，这会引入如下分量截断误差:

$$\vec{\mathcal{E}}_{\vec{P}^{|f}} := \vec{P}^{|f} - \vec{P}^{|f}_{lin} = \mathcal{O}(H[\vec{P}^{|z}] : \left[\vec{\mathcal{X}} \otimes \vec{\mathcal{X}}\right]) \ , \tag{5}$$

其中 $\mathcal{O}$ 表示数量级。

(*ii***)** 其次，通量项 $\vec{P}$ 在中心处的梯度通过截断进行近似。如果一个单元中心有 M 个单元中心邻居，则梯度计算如下:

$$\begin{bmatrix} \vec{\mathcal{Z}}^{(1)} \cdot \vec{e}_{x_1} & \vec{\mathcal{Z}}^{(1)} \cdot \vec{e}_{x_2} & \vec{\mathcal{Z}}^{(1)} \cdot \vec{e}_{x_3} \\ \vec{\mathcal{Z}}^{(2)} \cdot \vec{e}_{x_1} & \vec{\mathcal{Z}}^{(2)} \cdot \vec{e}_{x_2} & \vec{\mathcal{Z}}^{(2)} \cdot \vec{e}_{x_3} \\ \vdots & & \\ \vec{\mathcal{Z}}^{(M)} \cdot \vec{e}_{x_1} & \vec{\mathcal{Z}}^{(M)} \cdot \vec{e}_{x_2} & \vec{\mathcal{Z}}^{(M)} \cdot \vec{e}_{x_3} \end{bmatrix} \nabla\vec{P}^{|z} = \begin{Bmatrix} \vec{P}^{|z_1} - \vec{P}^{|z} \\ \vec{P}^{|z_2} - \vec{P}^{|z} \\ \vdots \\ \vec{P}^{|z_M} - \vec{P}^{|z} \end{Bmatrix}$$

$$-\frac{1}{2} \begin{Bmatrix} (\vec{\mathcal{Z}}^{(1)} \cdot \vec{e}_{x_1})^2 & (\vec{\mathcal{Z}}^{(1)} \cdot \vec{e}_{x_1})(\vec{\mathcal{Z}}^{(1)} \cdot \vec{e}_{x_2}) & \dots & (\vec{\mathcal{Z}}^{(1)} \cdot \vec{e}_{x_3})^2 \\ (\vec{\mathcal{Z}}^{(2)} \cdot \vec{e}_{x_1})^2 & (\vec{\mathcal{Z}}^{(2)} \cdot \vec{e}_{x_1})(\vec{\mathcal{Z}}^{(2)} \cdot \vec{e}_{x_2}) & \dots & (\vec{\mathcal{Z}}^{(2)} \cdot \vec{e}_{x_3})^2 \\ & \vdots & & \\ (\vec{\mathcal{Z}}^{(M)} \cdot \vec{e}_{x_1})^2 & (\vec{\mathcal{Z}}^{(M)} \cdot \vec{e}_{x_1})(\vec{\mathcal{Z}}^{(M)} \cdot \vec{e}_{x_2}) & & (\vec{\mathcal{Z}}^{(M)} \cdot \vec{e}_{x_3})^2 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} \partial^2_{x_1}\vec{P}^{|z} \\ \partial_{x_1}\partial_{x_2}\vec{P}^{|z} \\ \vdots \\ \partial^2_{x_3}\vec{P}^{|z} \end{Bmatrix}$$

$$- \sum_{n=3}^{\infty} \mathbf{Z}_n \partial^n \mathbf{P}$$

$$\Longleftrightarrow \mathbf{Z}_1 \nabla\vec{P}^{|z} = \Delta\vec{P} - \mathbf{Z}_2\partial^2\mathbf{P} - \sum_{n=3}^{\infty} \mathbf{Z}_n \partial^n \mathbf{P} \tag{6}$$

$$\Longrightarrow \nabla\vec{P}^{|z} = (\mathbf{Z}_1^T\mathbf{Z}_1)^{-1}\mathbf{Z}_1^T\Delta\vec{P} - (\mathbf{Z}_1^T\mathbf{Z}_1)^{-1}\mathbf{Z}_1^T\mathbf{Z}_2\partial^2\mathbf{P} + \text{higher order terms}, \tag{7}$$

其中 $\vec{\mathcal{Z}}^{(j)} = \vec{x}^{|z_j} - \vec{x}^{|z}$， $j \in [1, M]$； $(\Delta\vec{P})_j = \vec{P}^{|z_j} - \vec{P}^{|z}$； $\mathbf{Z}_n \in \mathbb{R}^{M \times (\dim\vec{P})^n}$ 包含 n质心之间的 z 阶空间距离以及邻居 z_j; 并且$\partial^n\mathbf{P} \in \mathbb{R}^{(\dim\vec{P})^n \times 维\ \vec{P}}$包含以下有序序列： n关于 $\vec{P}^{|z}$ 的 6 阶导数经线性化后得到 $\mathbf{Z}_1\nabla\vec{P}^{|z}_{lin} =$

$_{\rightarrow}\Delta P$，那么这会引入一个分量截断误差，其大小为

$$\boldsymbol{\mathcal{E}}_{\nabla\vec{P}^{|z}} := \nabla\vec{P}^{|z} - \nabla\vec{P}^{|z}_{lin} = \mathcal{O}(\left[\mathbf{Z}_1^T\mathbf{Z}_1\right]^{-1}\mathbf{Z}_1^T\mathbf{Z}_2\partial^2\mathbf{P}). \tag{8}$$

将式（5）、（8）代入式（3），

$$\oint_S \vec{P}\cdot\vec{n}dS = \underbrace{\sum_{f\in V}\vec{P}^{|f}_{lin}\cdot\vec{n}_f}_{F^c} + \underbrace{\left[\sum_{f\in V}(\vec{\mathcal{E}}_{\vec{P}^{|f}} + \boldsymbol{\mathcal{E}}_{\nabla\vec{P}^{|z}}\cdot\vec{\mathcal{X}})\cdot\vec{n}_f\right]}_{F^{trunc}}, \tag{9}$$

其中，括号中的项是由各面处分密度的线性化近似产生的总截断误差。在这种情况下，预计会出现量级为 F^{trunc} 的相损失，界面也会变得模糊。因此，有必要构造界面锐化项，$d = \mathcal{O}(-F^{trunc})$，以使方程（1）中的界面清晰可分辨，如图1所示。

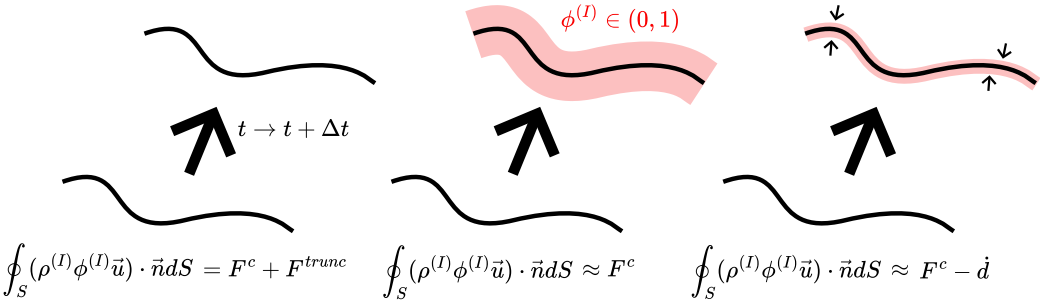


图1：有限体积法近似相关截断误差的扩散效应，以及通过界面锐化减轻该效应。

方程（1）的左侧，即守恒变量的选取，沿用 Sementilli [68]的方法。本研究将界面锐化和表面张力作为体力，加入这一既有流动方程组的右侧。对于界面锐化，首先考虑对ϕ进行锐化对流，即 $D\phi/Dt = \Gamma f_{sharp}$，其中 Γ 是缩放因子，而 f_{sharp} 是负扩散项

$$f_{sharp} = f_{sharp}(\phi, \nabla\phi) = \nabla\cdot\left[\varepsilon\nabla\phi - \phi(1-\phi)\frac{\nabla\phi}{||\nabla\phi||}\right] \tag{10}$$

如 [41] 中推导所得。随后，$\rho^{(I)}\phi^{(I)} \Leftrightarrow \rho^{(I)}\phi$ 的对流源项近似为

$$\begin{aligned}
&\rho^{(I)}\frac{D\phi}{Dt} = \rho^{(I)}\Gamma f_{sharp} \\
&\quad\Longrightarrow\quad \frac{\partial(\rho^{(I)}\phi)}{\partial t} + \nabla\cdot(\rho^{(I)}\vec{u}\phi) = \rho^{(I)}\Gamma f_{sharp} + \phi\frac{\partial\rho^{(I)}}{\partial t} + \phi\vec{u}\cdot\nabla\rho^{(I)}.
\end{aligned} \tag{11}$$

若相 I 由刚性气体状态方程表示（如本研究所采用的情况），则近似关系 $\partial\rho^{(I)}/\partial t \approx 0$ 和 $||\nabla\rho^{(I)}|| \approx 0$ 在单个单元中心处局部成立，从而得到源项

$$\frac{\partial(\rho^{(I)}\phi)}{\partial t} + \nabla\cdot(\rho^{(I)}\phi\vec{u}) = \dot{d} = \rho^{(I)}\Gamma f_{sharp}. \tag{12}$$

注意，方程 10表明 f_{sharp} 是体积分数梯度的函数，$\nabla\phi$。对于急剧不连续的 ϕ体积分数场，沿垂直于界面的方向计算导数会产生不稳定性 [69]。解决方法是将 ϕ 体积分数场与高斯滤波器进行卷积 G，使得

$$\tilde{\phi} = \phi * G \tag{13}$$

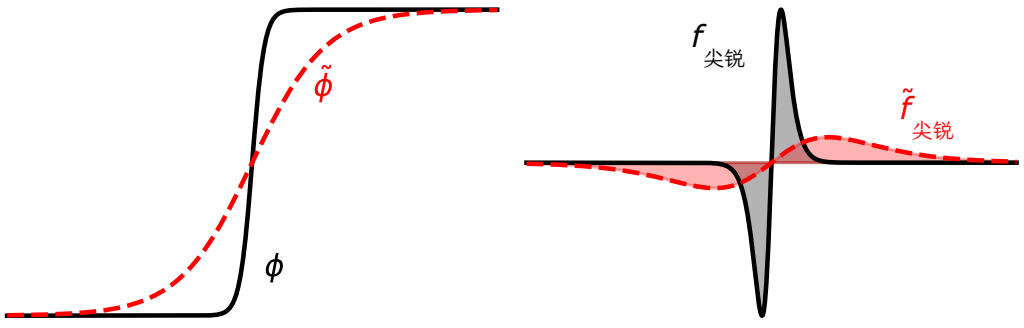
˜是一个平滑的辅助场，因此导数计算 $\nabla\phi$ 更加稳定。对于所有初始体积分数场 $\phi(\vec{x})$，该卷积均满足全局守恒条件

$$\int_{\mathbb{R}^{\dim\vec{x}}} \tilde{f}_{sharp}(\tilde{\phi}(\vec{x}), \nabla\tilde{\phi}(\vec{x}))d\vec{x} = \int_{\mathbb{R}^{\dim\vec{x}}} f_{sharp}(\phi(\vec{x}), \nabla\phi(\vec{x}))d\vec{x} \tag{14}$$

其中，卷积后的负扩散项为

$$\tilde{f}_{sharp} = \nabla\cdot\left[\varepsilon\nabla\tilde{\phi} - \tilde{\phi}(1-\tilde{\phi})\frac{\nabla\tilde{\phi}}{||\nabla\tilde{\phi}||}\right] \tag{15}$$

如图 2所示。



˜图 2：卷积体积分数场 ϕ 及其对应的负扩散项˜f_{sharp}。

关于（i）高斯标准差长度的选择与（ii）卷积积分边界的有限取值对解的精度的影响，详见附录 A。因此，源项经卷积后的形式为

$$\dot{d} = \rho^{(I)} \Gamma \tilde{f}_{sharp}. \tag{16}$$

对于表面张力，表面体积力的 Brackbill 表示为 [70],

$$\vec{F}^{sv} = \sigma \tilde{\kappa} \nabla \tilde{\phi} \tag{17}$$

其中 σ 为缩放系数，$\tilde{\kappa} = \nabla \cdot \left(\nabla \tilde{\phi} / ||\nabla \tilde{\phi}|| \right)$ 为修正曲率。式（17）中的项作为源项加到动量密度方程的右端，相应的功率则加到能量密度方程的右端。总之，式（1）中的源向量求解如下

$$\vec{S} = \begin{Bmatrix} \dot{d} \\ 0 \\ \rho \vec{f} + \vec{F}^{sv} \\ (\rho \vec{f} + \vec{F}^{sv}) \cdot \vec{u} + \dot{q} \end{Bmatrix}, \tag{18}$$

其中，ρf 表示其他体积力项，例如重力；$\dot{q}$ 表示适用情况下的热源。

2.2. 源向量离散化

在本研究中，场变量存储在计算域内有限体积的中心。对于结构化四边形网格，$\tilde{f}_{sharp}$、$\vec{F}^{sv}$ 源向量 $\vec{S}$（式（18））的标准离散化会涉及Δx_i，其依据的假设是：（i）单元中心等距分布，因此 Δx_i 为常数；以及（ii）单元边彼此垂直，因此其法向量与坐标轴对齐。然而，使用非结构化四边形网格时，这两个假设都不再成立。因此，本节旨在提出适用于任意单元中心分布的$\nabla \tilde{\phi} \to \tilde{f}_{sharp}$（$\nabla \tilde{\phi}$）$\vec{F}^{sv}$（$\nabla \tilde{\phi}$）离散化方法。

2.2.1. 梯度计算

鉴于 $\tilde{f}_{sharp} = \tilde{f}_{sharp}(\phi, \nabla \phi)$，必须能够计算各点处的导数。对于特定点，计算导数需要

了解如何定义邻点；对于非四边形网格，邻点不再由距离定义。然而，如果已知计算域中的每个点是中心、边还是顶点，就可以使用拓扑方法推导出每个单元的结构。具体而言，可以用哈斯图/有向无环图（DAG）表示各点，该图建立了单元之间的传递覆盖关系。由于任意网格（图 3a）与其对应的 DAG（图3）之间存在同构，覆盖关系足以定义网格的单元结构。本研究使用 PETSc DMPlex 的网格生成和同构 DAG 变换功能 [71, 72, 73]。

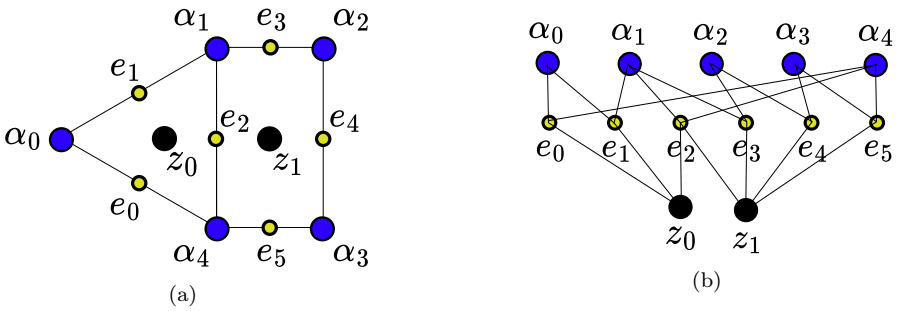


图 3：任意构造的网格与其哈斯图/DAG 之间的同构。中心为 z_j （黑色），边为 e_j （黄色），顶点为 α_j （蓝色）。(a)：网格。(b)：DAG。

根据 DAG，可以推导出每个点的单元邻点云或顶点邻点云。然后，在该点处求任意标量场$b = b(\vec{x})$ 的梯度，结果为

$$\nabla b\Big|_{point} = \frac{1}{V_{CV}} \sum_{neighbors \in CV} \hat{N}_{neighbor}\ b_{neighbor},$$

$$\hat{N}_{neighbor} = \sum_{facets \in neighbor} \hat{N}_{facet}. \quad (19)$$

此处，面是连接点的某个邻点与相邻边的线段， V_{CV} 表示由一组ˆ面围成的控制体，而 N_{facet} 表示面 [74]的外法向量。控制体和面的构成取决于(i) 点 $\mathscr{P}_1$ 是中心还是顶点，以及 (ii) 邻点云 $\mathscr{P}_2$ 是基于中心还是基于顶点。图 4展示了每种组合，

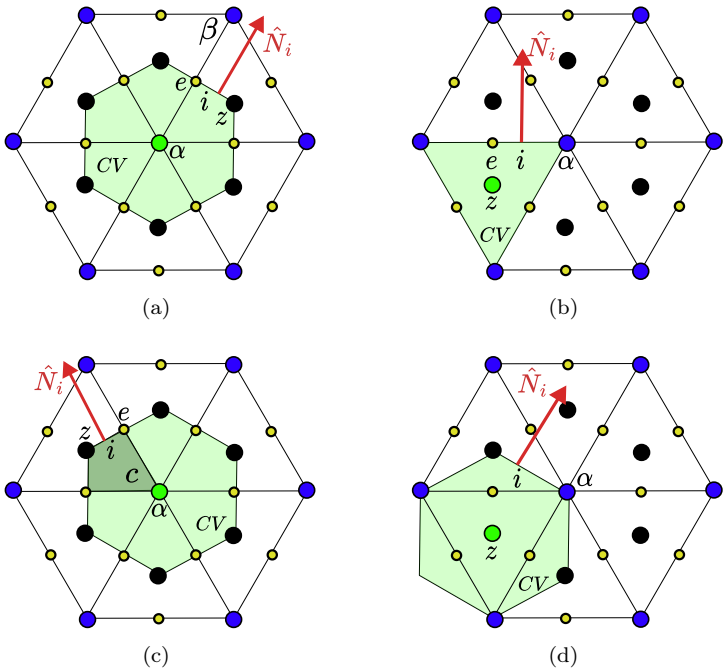


图4：由存储于 的场值获取在 处求值的场变量梯度的方法。中心为 z，边为 e，顶点为 α，β，面为 i，ˆ面法向量为 N_i，角点为 c。注意，角点由一个顶点、一个中心以及连接边所界定。(a)：**顶点**，**顶点**；(b)：**中心**，**顶点**；(c)：**顶点**，**中心**；(d)：**中心**，**中心**。

相应的每种梯度计算列于表 1中，其中{$\mathscr{P}_1 \in$ (顶点，中心) $\mathscr{P}_2 \in$ (顶点，中心)}。

$\mathscr{P}_1, \mathscr{P}_2$: $\nabla b\big\|_{\mathscr{P}_1} = f[b(\sum \mathscr{P}_2)]$	Fig.	公式
$\mathscr{P}_1 =$ 顶点，$\mathscr{P}_2 =$ 顶点	4(a)	$\nabla b\big\|_{\alpha} = \frac{1}{V_{CV}} \sum_{e \in CV} \hat{N}_e b_e$ $\hat{N}_e = \sum_{i \in e} \hat{N}_i$ $b_e = (b_\alpha + b_\beta)/2$
$\mathscr{P}_1 =$ 中心，$\mathscr{P}_2 =$ 顶点	4(b)	$\nabla b\big\|_{z} = \frac{1}{V_{CV}} \sum_{\alpha \in CV} \hat{N}_\alpha b_\alpha$ $\hat{N}_\alpha = \sum_{i \in \alpha} \hat{N}_i$
$\mathscr{P}_1 =$ 顶点，$\mathscr{P}_2 =$ 中心	4(c)	$\nabla b\big\|_{\alpha} = \frac{1}{V_{CV}} \sum_{c \in CV} \hat{N}_c b_{z(c)}$ $\hat{N}_c = \sum_{i \in c} \hat{N}_i$
$\mathscr{P}_1 =$ 中心，$\mathscr{P}_2 =$ 中心	4(d)	$\nabla b\big\|_{z} = \frac{1}{V_{CV}} \sum_{z \in CV} \hat{N}_z b_z$ $\hat{N}_z = \sum_{i \in z} \hat{N}_i$

表1

采用表1中所述的策略，本节其余部分将介绍源项的计算。

2.2.2. 负扩散场的计算

设卷积体积分数场 ϕ 存储在单元中心，z，并将顶点记为 α。于是，在中心处求解方程（$(f_{sharp})_z$ 中的 10）所示的过程分为两步。(i) 首先，$\nabla\phi_\alpha$ 根据单元中心的平滑体积分数信息，采用图 ϕ_z所示的方法在顶点处计算4c。然后

$$\vec{a}_\alpha = \left[\varepsilon\nabla\tilde{\phi}_\alpha - \tilde{\phi}_\alpha(1-\tilde{\phi}_\alpha)\frac{\nabla\tilde{\phi}_\alpha}{||\nabla\tilde{\phi}_\alpha||}\right] = \sum_j a_\alpha^{(j)}\hat{e}_j, \tag{20}$$

其中，ϕ_α 是相邻 ϕ_z 的加权平均值，而e_j 表示基向量。(ii) 其次，$(f_{sharp})_z = (\nabla\cdot\vec{a})_z$ 根据基于顶点的标量场$a_\alpha^{(j)} \in \vec{a}_\alpha$的梯度的对角分量，采用图4b所示的方法在中心处计算。即：

$$(f_{sharp})_z = \mathrm{Tr}\left\{\nabla(a_\alpha^{(1)}) \quad \nabla(a_\alpha^{(2)}) \quad \nabla(a_\alpha^{(3)})\right\} \implies \dot{d}_z = \Gamma_1\rho^{(I)}(\tilde{f}_{sharp})_z. \tag{21}$$

2.2.3. 表面张力场的计算

获取表面力场需要计算单元中心的曲率和体积分数梯度，如式（17）所示。设平滑后的体积

˜分数 ϕ 存储在单元中心， z，并以 α表示顶点。那么，在中心处获取曲率的过程分为两步：（i）首先，根据单元中心的平滑体积 $\vec{n}_\alpha$ 分数信息，在顶点处计算向量场˜， ϕ所用方法如图4c所示。（ii）其次，根据基于顶点的标量场梯度的对角分量，在中心处计算 $\tilde{\kappa}_z$， $n_\alpha^{(j)} \in \vec{n}_\alpha$所用方法如图4b所示。即

$$\tilde{\kappa}_z = \mathrm{Tr}\left\{\nabla(n_\alpha^{(1)}) \quad \nabla(n_\alpha^{(2)}) \quad \nabla(n_\alpha^{(3)})\right\}. \tag{22}$$

˜最后， $\nabla\phi_z$ 根据以单元为中心的平滑体积分数信息，在中心处计算˜， ϕ 采用图中所示的方法。4d。

2.3. 系统闭合

式（1）所描述的可压缩流动系统追踪其中一个相的分密度，以及单位体积的混合物质量密度、混合物动量密度和混合物能量密度（$\rho^{(I)}\phi$， ρ，$\rho\vec{u}$， ρe）。然而，该系统并未给出压力、温度、体积分数，以及各个相的密度和内能（p， T， ϕ， $\rho^{(I),\ (II)}$， $e^{(I),\ (II)}$）。此类辅助变量可通过建立各相所遵循的热力学状态方程来求解（假设分子体积可忽略且分子碰撞完全弹性） [75]。如式（23）所示，各种流体均采用刚化状态方程建模。

$$\begin{cases} p = (\gamma - 1)\rho e - \gamma p^0, \\ a = \sqrt{\gamma(p + p^0)}/\rho, \\ e = C_p T/\gamma + p^0/\rho. \end{cases} \tag{23}$$

此外，质量分数的概念可直接由守恒变量得到，即 $Y_{(I)} = \phi\rho^{(I)}/\rho$，$Y^{(II)} = 1 - Y_{(I)}$. 质量分数衡量各相对混合物总密度和总内能的相对贡献。表示这些权重的方程为

$$\frac{1}{\rho} = \frac{Y^{(I)}}{\rho^{(I)}} + \frac{Y^{(II)}}{\rho^{(II)}}, \tag{24}$$

$$e = Y^{(I)}e^{(I)} + Y^{(II)}e^{(II)}. \tag{25}$$

然后，通过最小化由以下各项构成的方程组的残差，可得到辅助变量 $\vec{A} = \{\rho^{(I)}, \rho^{(II)}, T := T_{(I)} = T^{(II)}\}$： $p^{(I)} = p^{(II)}$以及方程（24）、（25）。残差为 $\vec{r}(\vec{A}) = \{f_1(\vec{A}) \ f_2(\vec{A}) \ f_3(\vec{A})\}^T \to \vec{0}$，其中

$$
\begin{aligned}
f_1(\vec{A}) = \gamma^{(II)}(\gamma^{(I)} - 1)(\rho C_p^{(I)} T + \gamma^{(I)} p^{0(I)})\rho^{(I)} - \rho\gamma^{(I)2}\gamma^{(II)} p^{0(I)} \\
- \gamma^{(I)}(\gamma^{(II)} - 1)(\rho C_p^{(II)} T + \gamma^{(II)} p^{0(II)})\rho^{(II)} + \gamma^{(II)2}\gamma^{(I)} p^{0(II)}\rho, \\
f^{(II)}(\vec{A}) = Y^{(I)}\rho\rho^{(II)} + Y^{(II)}\rho\rho^{(I)} - \rho^{(I)}\rho^{(II)}, \\
f_3(\vec{A}) = Y^{(I)}\gamma^{(II)}(\rho C_p^{(I)} T + \gamma^{(I)} p^{0(I)}) \\
+ Y^{(II)}\gamma^{(I)}(\rho C_p^{(II)} T + \gamma^{(II)} p^{0(II)}) - \rho\gamma^{(II)}\gamma^{(I)} e. \quad (26)
\end{aligned}
$$

辅助变量通过牛顿-拉夫森方法更新 $\vec{A}^{k+1} = \vec{A}^k - \mathbf{J}^{-1}\vec{r}(\vec{A}^k)$，$k = 0$，1，...，$J_{ij} = \partial f_i(\vec{A}^k)/\partial A_j^k$。本研究采用 PETSc 的牛顿-拉夫森实现 [71, 72, 73]。

此外，体积分数计算为 $\phi = [\rho^{(I)}\phi]/\rho^{(I)}$，而辅助变量 $e^{(I)}, e^{(II)}, p$可根据式（23）从状态方程中反推出。然而需要注意，压力状态方程 $p = f(\rho) = (\gamma - 1)\rho e - \gamma p^0$ 对密度解的数值变化十分敏感。例如，采用水在室温下的热力学常数，$\{T, \gamma, p^0, C_p\} = \{300\,\mathrm{K}\ 1.932, 1.1639 \times 10^9\,\mathrm{Pa}\ 8095.08\ \mathrm{Jkg^{-1}K^{-1}}\}$，可得$f(\rho = 998.23\ \mathrm{kgm^{-3}}) = 10^5$ Pa。若密度仅变化 -0.01%，则计算得到的压力为 $f(\rho = 998.10\,\mathrm{kgm^{-3}}) = -5.23 \times 10^4$ Pa，这是不符合物理规律的。这表明需要采用压力松弛函数，对密度被低估时的压力解进行平滑处理，使压力不会被计算为负值。因此，在此步骤中，压力状态方程被修改为

$$
p(\rho) = \begin{cases} \frac{\psi_1}{\psi_2 - \rho} + \psi_3 & \rho \le \bar{\rho} \\ (\gamma - 1)\rho e - \gamma p^0 & \rho > \bar{\rho} \end{cases} \quad (27)
$$

其中，$\psi_1 = \bar{p}'\bar{p}^2\bar{\rho}^2/(\bar{p} - \bar{p}'\bar{\rho})$ $\psi_2 = -\bar{p}\bar{\rho}^2/(\bar{p} - \bar{p}'\bar{\rho})$ $\psi_3 = -\bar{p}^2/(\bar{p} - \bar{p}'\bar{\rho})$，$\bar{p} = (\gamma - 1)\,\bar{\rho}e - \gamma p^0$，$\bar{p}' = (\gamma - 1)\bar{\rho}e$，而 $\bar{\rho}$ 是与所关注流体相对应的预期密度量级（对于水，采用 $\bar{\rho} = 998.23\ \mathrm{kgm^{-3}}$）。式（27）满足一致性条件 $p(0) = 0$、$p(\bar{\rho}) = \bar{p}$，以及$dp(\bar{\rho})/d\rho = \bar{p}'$。

2.4. 通量计算

本研究所用可压缩多相流系统中的通量以强形式写在式（1）左端第二项中。对单元体积 V 进行积分，并应用散度定理，得到

$$\int_V \nabla \cdot \begin{Bmatrix} \rho^{(I)}\phi\vec{u} \\ \rho\vec{u} \\ \rho\vec{u}\otimes\vec{u}+p\mathbf{I}-\boldsymbol{\tau} \\ \rho e\vec{u}-\boldsymbol{\tau}\cdot\vec{u} \end{Bmatrix} dV = \oint_S \begin{Bmatrix} \rho^{(I)}\phi(\vec{u}\cdot\vec{n}) \\ \rho(\vec{u}\cdot\vec{n}) \\ \rho(\vec{u}\cdot\vec{n})\vec{u}+p\vec{n}-\boldsymbol{\tau}\cdot\vec{n} \\ \rho(\vec{u}\cdot\vec{n})H-(\boldsymbol{\tau}\cdot\vec{u})\cdot\vec{n} \end{Bmatrix} dS \tag{28}$$

其中 S 是单元体积的表面，$\vec{n}$ 表示表面法向量。在有限体积法中，曲面积分离散为沿单元体积面计算场变量的求和，如式（3）所示。然而，场变量存储在单元中心，因此必须引入某种方法来计算面上的各种质量通量（$\dot{m} := \rho(\vec{u}\cdot\vec{n})$）和压力（$p$）（以下标 $_{1/2}$表示）。对此，一种常用方案是采用带有附加压力和速度扩散项的对流迎风分裂方法（AUSM+up），该方法源自 Liou 等人的研究[76, 77, 78]。此方法需要输入左右两侧的混合物声速（以下标 $_{L/R}$表示）。在本研究中，它们通过以下方式近似得到

$$a_{L/R} = \sqrt{\frac{1}{\phi_{L/R}/a_{L/R}^{(I)2} + (1-\phi_{L/R})/a_{L/R}^{(II)2}}}. \tag{29}$$

由此可得，左右两侧的混合物马赫数为 $M_{L/R} = u_{L/R}/a_{1/2}$，其中 $u_{L/R}$ 是垂直于左右两侧面的速度分量，且$a_{1/2} = (a_L + a_R)/2$。界面上的平均混合物马赫数近似为

$$M_o = \sqrt{\min[1, \max\left(\overline{M}^2, M_\infty^2\right)}, \tag{30}$$

其中

$$\overline{M}^2 = \frac{u_L^2 + u_R^2}{2a_{1/2}}$$

且 M_∞ 是表示预期马赫数大小的常数。那么，界面混合物马赫数为

$$M_{1/2} = f_4^+(M_L) + f_4^-(M_R) - \frac{K_p}{f_a}\max\left(1-\sigma_M\overline{M}^2, 0\right)\frac{p_R-p_L}{\rho_{1/2}a_{1/2}^2}, \tag{31}$$

其中

$$f_4^{\pm}(x) = \begin{cases} f_1^{\pm}(x) & |x| \geq 1, \\ [1 \mp 16\beta f_2^{\mp}(x)] f_2^{\pm}(x) & |x| < 1, \end{cases}$$

$$f_1^{\pm}(x) = \frac{1}{2}(x \pm |x|),$$

$$f_2^{\pm}(x) = \pm\frac{1}{4}(x \pm 1)^2,$$

$$f_a = M_o(2 - M_o),$$

常数 $\{K_p, \sigma_M, \beta\} = \{0.25, 1.0, 0.125\}$ 和 $\rho_{1/2} = (\rho_L + \rho_R)/2$。界面质量通量计算如下

$$\dot{m}_{1/2} = a_{1/2} M_{1/2} \begin{cases} \rho_L & M_{1/2} > 0, \\ \rho_R & M_{1/2} \leq 0, \end{cases} \tag{32}$$

界面压力为

$$p_{1/2} = p_L f_5^+(M_L) + p_R f_5^-(M_R) - \frac{3}{4}(\rho_L + \rho_R)(f_a a_{1/2})(u_R - u_L) f_5^+(M_L) f_5^-(M_R), \tag{33}$$

其中

$$f_5^{\pm}(x) = \begin{cases} \frac{1}{x} f_1^{\pm}(x) & |x| \geq 1, \\ [(\pm 2 - x) \mp 3(-4 + 5f_a^2) x f_2^{\mp}(x)] f_2^{\pm}(x) & |x| < 1. \end{cases}$$

根据方程（32）、（33），质量通量项和压力项在面上求解，并可代入方程（28）中的通量矢量，因为曲面积分是离散化的。

3. 结果

本节分为两部分。第 3.1 节通过使用一系列测试算例对求解器进行测试，展示界面锐化和表面张力模型的空间收敛性与精度。第 3.2 节将这些模型结合起来，应用于一系列韦伯数和奥内佐格数相关的流体流动，旨在量化液滴形状和尺寸随这些无量纲参数的变化。

3.1. 验证

3.1.1. 曲率收敛

为评估界面曲率计算的收敛特性，我们在表面曲率均匀的单位球上进行网格加密研究， $\kappa = 1$。每次测试中，计算域均采用更精细的网格间距 $h \in [10^{-3}, 10^{-1}]$，预期随着网格加密，曲率解会更加精确。用于量化误差的指标为

$$\kappa^{\delta}_{\{1,2,\infty\}} := \left|\left|\kappa_{sim}\big|_{r=1} - \kappa_{true}\big|_{r=1}\right|\right|_{\{1,2,\infty\}}, \tag{34}$$

其量化了在 $r = 1$处通过模拟计算得到的曲率与同一位置处解析曲率之间的差异。该指标表示为 h 的函数，如图 5所示。结果表明， κ^{δ}_{1}、 κ^{δ}_{2}、 κ^{δ}_{∞} 的收敛阶分别为 0.97、0.98 和 0.85，表明其以近似一阶的阶数收敛。

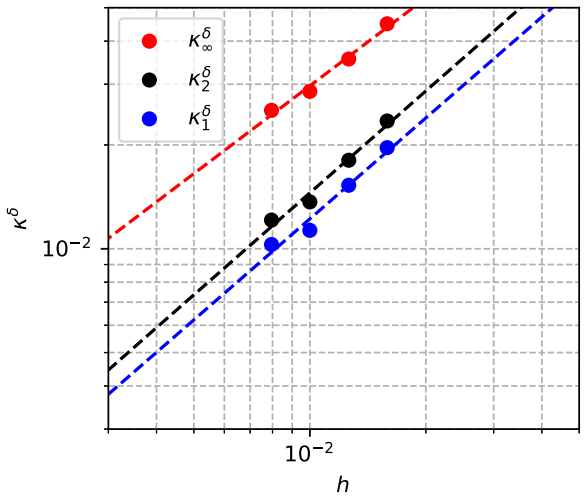


图 5：曲率计算的收敛性分析。

3.1.2. 静止的初始弥散圆

将最初弥散的圆形界面转变为锐利界面，是对界面锐化项最直接的检验

在式 16中提出。由于负扩散项沿由体积分数场梯度所决定的方向作用，因此直观的做法是设定一个初始条件，使其沿径向向外方向从 $\phi = 1.0$ 逐渐过渡到 $\phi = 0.0$ 。令下标$_0$ 表示初始条件。然后通过以下方式初始化弥散界面

$$\phi_0(r) = \frac{1}{2}\left[\tanh\left(\frac{R+r}{2\varepsilon_0}\right) + \tanh\left(\frac{R-r}{2\varepsilon_0}\right)\right] \tag{35}$$

其中 $r = \sqrt{x^2 + \overline{y^2;\quad x}}$，$y \in [-0.05, 0.05]$；$h = 10^{-3}$；$\varepsilon_0 = 8h$ 用于缩放初始过渡区域的厚度；$R = 0.025$ 是$\phi = 0.5$ 等值线的半径。对所有变量的四条边均施加齐次诺伊曼边界条件。

初始条件为 $\gamma^{(I)} = 1.400$，$\gamma^{(II)} = 1.932$，$\rho_0^{(I)} = 1.16$，$\rho_0^{(II)}$ =998.23，$C_p^{(I)} = 1004.50$，$C_p^{(II)} = 8095.08$，$p^{0(I)} = 0$，$p^{0(II)} = 1.1645 \times 10^9$，并令 Δt，t_f 分别为 10^{-7} 和 $500\Delta t$ 。本研究比较了四边形网格单元与单纯形网格单元之间的结果，二者的尺寸均受间距 h 的限制。

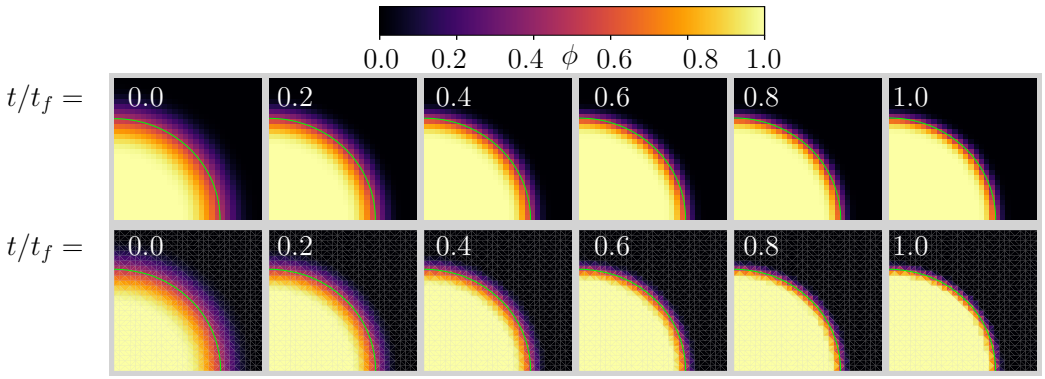


图6: 仅进行界面锐化时，弥散圆形体随时间演化的 ϕ 场。绿色线条表示最终$\phi = 0.5$ 等值线的位置。上：四边形网格。下：单纯形网格。

图 6 展示了随时间演化的体积分数场，其中预先施加的过渡区收敛为二元跃变，这一现象在四边形网格和单纯形网格上均可观察到。为量化这两种收敛速率，采用了两个指标

$$\varepsilon^* := \frac{\left|\max(r|_{\phi=0.5\pm0.25}) - \min(r|_{\phi=0.5\mp0.25})\right|}{h}, \qquad r^* := \frac{\mathrm{std}\left(r\big|_{\phi=0.5}\right)}{h} \tag{36}$$

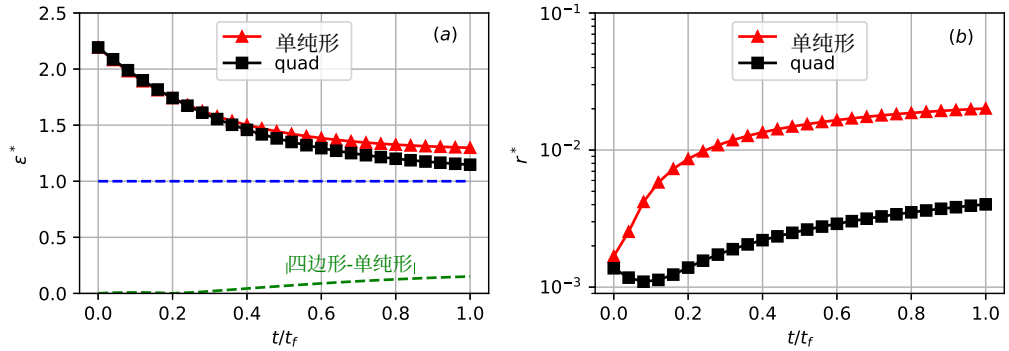


图 7: （a）随时间演化的归一化界面厚度参数及其渐近线$\varepsilon^* \longrightarrow 1$，表明界面厚度收敛至单个切割单元。蓝线表示渐近线，绿线表示四边形网格与单纯形网格之间的厚度差异。（b）随时间演化的归一化径向标准差 $r^* \ll 1$，表明界面畸变较小。

分别用于衡量过渡区长度和半径形状。在式（36）中，$r\big|_{\phi\in[0,1]}$ 指计算域中特定 ϕ值对应的等值线半径。这些等值线通过 Matplotlib 的插值功能获得。式（36）中的两个指标 ε^*、r^* 均以网格间距大小 h归一化，用以表示界面沿径向向外延伸跨越的网格数（i，对应 ε^*），以及半径沿表面偏离的程度（ii，对应 r^*）。随时间变化的第一个预期行为是 $\varepsilon^* \longrightarrow 1$，表示界面收敛至仅占据一个切割单元的状态。图 7（a）展示了这一现象，无论是四边形网格还是单纯形网格均如此。随时间变化的第二个预期行为是 $r^* \approx$ 常数，表示在没有速度场时形状保持不变。图 7（b）中，单纯形网格对应的情形在径向上的偏差比四边形网格高一个数量级。然而，对于所有 $t \in [0, t_f]$，该偏差均被限制在 std（$r|_{\phi=0.5}$）$\leq \mathcal{O}(10^{-2}h) \ll h$以内。

3.1.3. Zalesak 圆盘

Zalesak圆盘是对具有对流 [19, 79, 80, 81, 82]特征的界面锐化格式保真度的经典测试。测试条件如下：初始化一个由相 I 表征的带槽圆盘，嵌入计算域 x，$y \in [0, 1]$。将圆盘中心置于 (0.5，0.75)，并取

半径为 0.15。插入一个由背景相（即相 II）表征的矩形槽，宽度为 0.05，深度为 0.25。施加恒定速度场 $\vec{u}(t) = 2\pi\{(-y+0.5),\ (x-0.5)\}^T/t_f$，以在时间区间 $t \in [0, t_f]$ 内完成一次完整旋转。理想解使开槽圆盘的界面回到其原始位置和形状（即在 $t = 0$），且槽的锐度没有损失。可根据 1-、2- 和 ∞-范数，对照该理想解评判圆盘的模拟行为

$$\mathscr{I}^{\delta}_{\{1,2,\infty\}} := \left|\left|\mathscr{I}_{sim} - \mathscr{I}_{true}\right|\right|_{\{1,2,\infty\}}, \tag{37}$$

其中

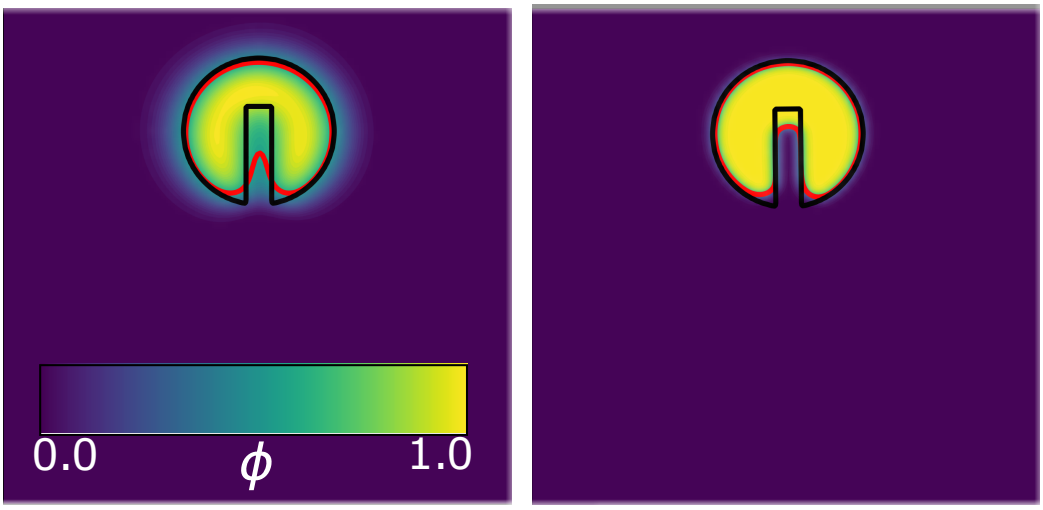
$$\begin{cases} \mathscr{I}_{sim} := \{\vec{x} \in \Omega \text{ s.t. } \phi(\vec{x})\Big|_{t=t_f} = 0.5\}, \\ \mathscr{I}_{true} := \{\vec{x} \in \Omega \text{ s.t. } \phi(\vec{x})\Big|_{t=0} = 0.5\}. \end{cases} \tag{38}$$

此处 Ω 表示计算域，而 $\mathscr{I}_{sim}$，$\mathscr{I}_{true}$ 包含 $\phi = 0.5$ 上分别对应模拟和理想情形的一组点，如 [19]所规定。图 8 展示了界面锐化分量对经过完整旋转后的 Zalesak 圆盘产生的定性反扩散影响。图 9a 展示了网格间距为 $h \sim 2 \times 10^{-2}$，$h \sim 10^{-2}$，和 $h \sim 5 \times 10^{-3}$时 Zalesak 圆盘在 $[0, t_f]$中的旋转过程；图 9b 则根据方程（37）中定义的参数，对相同情形下的界面保持进行量化。

与 Nguyen [19], 报告的结果相比，$h \sim 10^{-2}$ 的绝对误差幅值更大；然而，根据以下分析，本研究报告的收敛阶更高。Nguyen 将收敛结果表示为库朗数 C的函数。网格间距与其成正比 $h \propto 1/C$，这意味着根据误差随 C 的变化推导出的收敛阶，可以映射为根据误差随h变化推导出的收敛阶。根据这一映射，可由 $\mathscr{I}^{\delta}_1$、$\mathscr{I}^{\delta}_2$和 $\mathscr{I}^{\delta}_{\infty}$分别计算出 0.71、0.72 和 0.80 的收敛阶。相比之下，本研究的结果显示，[19]的收敛趋势更陡，$\mathscr{I}^{\delta}_1$ 和 $\mathscr{I}^{\delta}_2$的收敛阶分别为 1.19 和 1.16。对于 $\mathscr{I}^{\delta}_{\infty}$，收敛趋势稍缓，收敛阶为 0.69。为便于直接进行视觉比较，图 [19] 9b 中绘出了根据 计算得到的斜率，作为参考线。

3.1.4. 形状恢复

本节旨在测量界面锐化与表面张力模型相结合后的精度和守恒特性



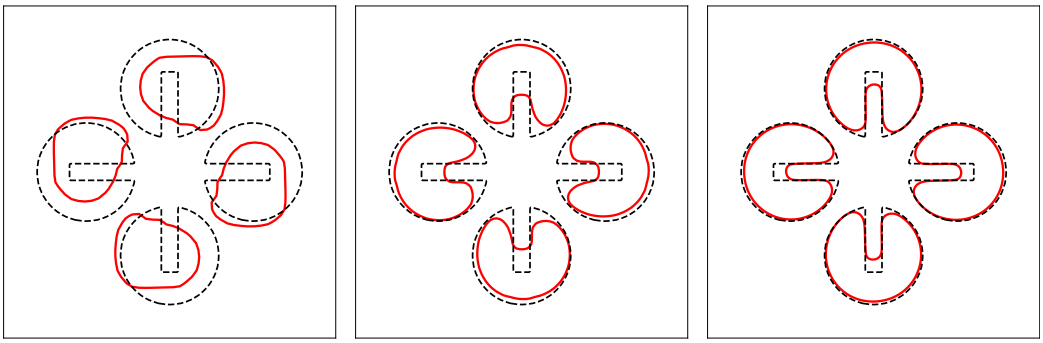
(a) (b)

图8：对于 (a) 未采用界面锐化和 (b) 采用界面锐化的情况，模拟的 Zalesak 圆盘旋转一周后的结果。

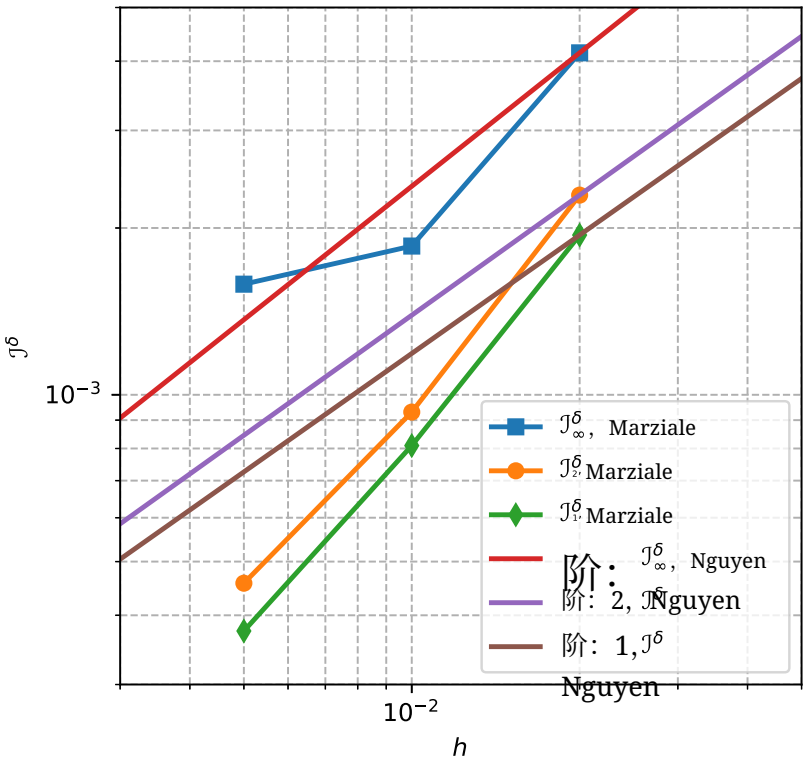
在二维和三维中的表现。本节的测试算例受以下原则启发：(i) 表面张力会使初始曲率不均匀的形状变为 n球（二维中的圆或三维中的球体）。此外，(ii) 各相质量守恒这一原则意味着，给定初始解析界面，即可得到与表面张力驱动运动的平衡位置对应的最终均匀半径。本节分为两部分，旨在证明本研究所提出模型中(i)、(ii) 的有效性。第 3.1.4.1 节利用杨-拉普拉斯条件计算四角星在表面张力驱动位移下的稳态界面尺寸、形状和压力跃变，并将该结果与模拟行为进行比较。第 3.1.4.2 节采用星形的三维抽象，模拟随时间演化的各相质量损失。

第 3.1.4.1 量化组合模型在某一过程中与 Young-Laplace方程的一致程度

*3.1.4.1. Young-Laplace*一致性。 为展示模型即使在高正曲率区域与负曲率区域彼此邻近的情况下，仍能精确计算体力项的能力，假设界面呈四角星形状。星体的初始半径满足



(a)



(b)

图 9：(a) 网格间距 $h \sim 2 \times 10^{-2}, 10^{-2}, 5 \times 10^{-3}$ （从左到右）的 Zalesak 圆盘界面演化，与理想情形进行比较。(b)界面误差的收敛阶，使用公式（37）量化，并与根据 Nguyen 报告的结果计算出的斜率进行比较 [19]。

$$r_0(\theta) = L\sqrt{\frac{\cos\left(\frac{2\sin^{-1}k+m\pi}{2n}\right)}{\cos\left(\frac{2\sin^{-1}(k\cos n\theta)+m\pi}{2n}\right)}} \tag{39}$$

使得 $\phi_0(r_0) = 0.5$，其中 $m = 27.4$、 $n = 4$、 $k = 0.5$， $L = 2.7971 \times 10^{-2}$ 和 $\theta \in [0, 2\pi]$。下标 $0,\ f,\ \infty$ 分别表示初始状态、最终状态和远场状态；流体 II 位于星体内部，流体 I 占据远场。然后，假设初始时计算域为等压区域，且满足 $\Delta p_0 = 0$，便可根据守恒原理推导出表面张力使星体变形所引起的预期压力跃变 Δp_f。根据质量守恒

$$\rho_f^{(II)} r_f^2 = \frac{\rho_0^{(II)}}{\pi} A_{star} \tag{40}$$

其中 $A_{star} = \frac{1}{2}\int_0^{2\pi} r_0^2(\theta)d\theta$。注意，若 $\rho_f^{(II)} \approx \rho_0^{(II)}$ 可以合理近似，则方程(40)可简化为 $r_f = \sqrt{A_{star}/\pi}$。若不能，则结合杨-拉普拉斯条件和状态方程，可通过以下关系求解流体 II 的最终密度

$$\begin{aligned}
&\Delta p_f = \frac{\sigma}{r_f} \\
&\Longrightarrow \rho_f^{(II)} = \left[\frac{\sigma}{r_f} + (\gamma^{(I)} - 1)\rho_\infty^{(I)}\frac{C_p^{(I)}T}{\gamma^{(I)}} + p^{0(I)} - p^{0(II)}\right]\frac{\gamma^{(II)}}{(\gamma^{(II)} - 1)C_p^{(II)}T} \\
&\qquad := \beta_1 + \frac{\beta_2}{r_f}.
\end{aligned} \tag{41}$$

将其代入式（40），

$$\beta_1 r_f^2 + \beta_2 r_f - \frac{\rho_0^{(II)}}{\pi} A_{star} = 0. \tag{42}$$

利用方程（42），可以根据初始半径和两种一般刚化气体的初始热力学性质推导出最终半径。在此情况下，取 $\sigma = 2000$， $\gamma^{(I)} = 1.400$，
$\gamma^{(II)} = 1.932$， $\rho_0^{(I)} = 1.16$， $\rho_0^{(II)} = 998.23$， $C_p^{(I)}$ =1004。50，
$C_p^{(II)} = 8095.08$， $p^{0(I)} = 0$， $p^{0(II)} = 1.1645 \times 10^9$。由于相$II$ 在 $M \ll 1$ 下几乎不可压缩，表面张力引起的压力变化所导致的密度变化可以忽略；因此，方程（40）可简化为$r_f \approx 2.00 \times 10^{-2}$。

然后，求解得到在 $t = t_f$ 处两种流体界面两侧的预期压力跃变为 $\Delta p_f = \sigma / r_f \approx 1.00 \times 10^5$。

本节余下部分旨在比较预期的界面压力跃变与模拟得到的结果， Δp_{sim}。为此，引入指标 $[\Delta p_{sim} - \sigma\kappa_f](\sigma\kappa_f)^{-1}$，以评估模拟结果相对于解析解随时间变化的百分比误差。此外，由于预期表面张力会使星形变为 θ中的均匀半径，因此引入式 r^* (36)中的无量纲指标，以比较沿界面（$\phi = 0.5$）等值线的径向变化幅度与网格间距大小。换言之， r^* 反映了沿表面半径变化所跨越的网格间距数量；因此，$r^* \longrightarrow 0$ 预期会随时间变化。其余计算域设置细节如下：令 x， $y \in [-0.035, 0.035]$ 网格间距大小为 $h \sim 10^{-3}$；对四条边均施加零导数边界条件 $\partial\{\rho^{(I)}\phi, \rho, \rho\vec{u}, \rho e, p, \phi\}^T / \partial n = 0$；并令 $\Delta t = 10^{-7}$， $t_f = 2\Delta t \times 10^4$。

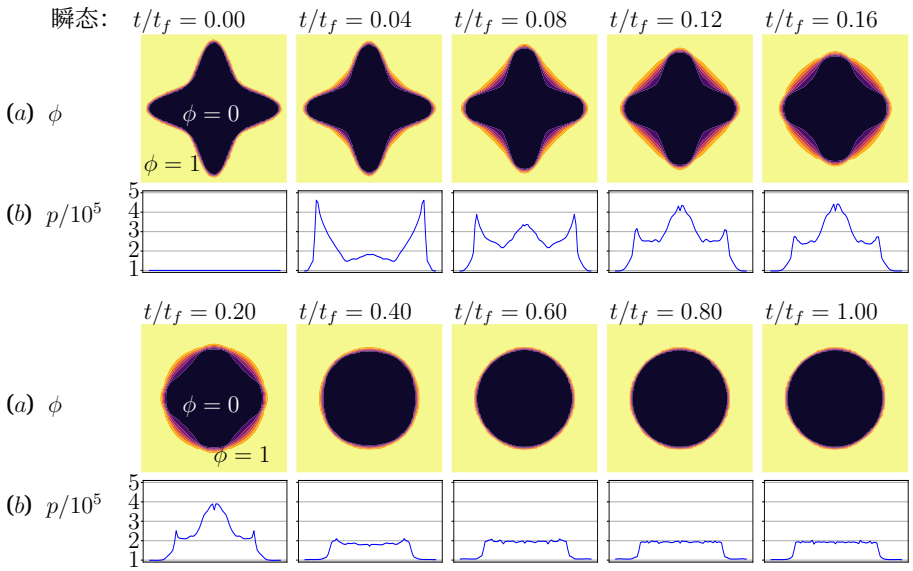


图10：表面张力作用下，星形界面弛豫为圆的时间演化。（a）： ϕ 场；（b）： $y = 0$ 切片处对应的压力跃变。

随时间演化的体积分数场以及同时的压力截面在 $y = 0$ 处对应于该模拟的结果可视化于图 10。此外，随时间演化的指标 r^*， $[\Delta p_{sim} - \sigma\kappa_f]$（$\sigma\kappa_f$）$^{-1}$ 示于图11。界面最初沿径向振荡，测量量为

r^*（$t/t_f \in [0, 0.4]$）于图 11（a）所示，这是由于与星形相关的高能状态所致。然而，界面在振荡过程中迅速趋近均匀圆形，使得标准径向偏差如 $t \longrightarrow t_f$ 所示与约 $h/5$相当，测量量为 r^*（$t/t_f = 1$），见图 11（a）。此外，请注意其迅速收敛至压力跃变 $\Delta p_{sim} \longrightarrow \sigma\kappa_f$，见图 11（$b$），与式（41）一致。

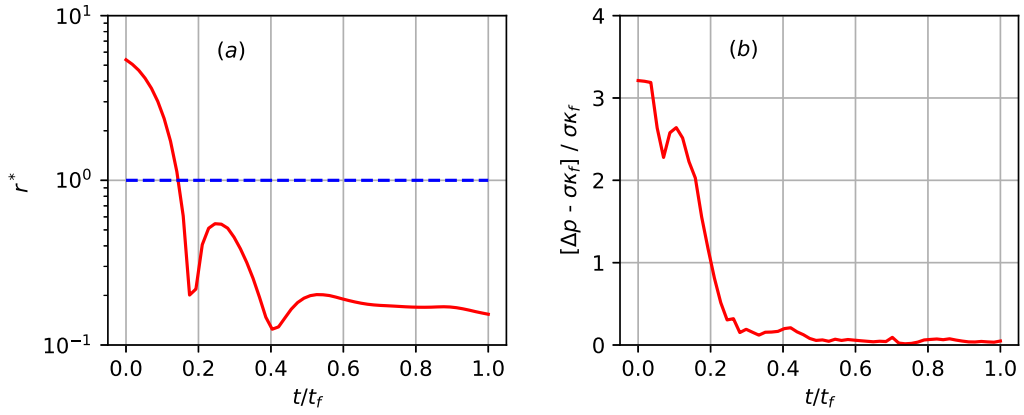


图11：(a) 随时间演化的归一化径向标准差 r^*。蓝线表示$r^* = 1$，即半径偏差小于一个网格间距时所对应的阈值。(b) 随时间演化的杨-拉普拉斯百分误差 $[\Delta p - \sigma\kappa_f]/\sigma\kappa_f \longrightarrow 0$，表明其收敛至预期解。

3.1.4.2. 相守恒。多相流模型假设两个相的分密度均守恒。具体而言，混合密度ρ以及相 I的分密度 $\rho^{(I)}\phi$均守恒，这意味着在条件 $\rho^{(II)}\phi^{(II)}$ 下，$\phi^{(I)} + \phi^{(II)} = 1$也守恒。如第3.1.4节所述，该模型假设符合物理实际，并构成推导流体团预期平衡位置的基础。因此，有必要量化界面锐化对相质量守恒随时间变化的影响。界面锐化作为施加于相 I的人工右端项贡献引入。尤其是，两个相之间较高的密度比会导致体积分数中的微小数值误差产生大得不成比例的相密度误差。

以这种方式对模型进行压力测试的愿望促使采用初始条件 $\gamma^{(I)} = 1.400$，$\gamma^{(II)} = 1.932$，$\rho_0^{(I)} = 1.16$，$\rho_0^{(II)} = 998.23$，$C_p^{(I)}$ =1004.50，$C_p^{(II)} = 8095.08$，$p^{0(I)} = 0$，$p^{0(II)} = 1.1645 \times 10^9$。界面几何-

ometry所用的是表面张力驱动的形状恢复的三维抽象，见第3.1.4.1节，不过本例由一组相连椭圆构成，而非通过单一径向函数。其余计算域设置细节如下：令 x， y， $z \in [-0.035, 0.035]$，网格间距大小为 $h \sim 10^{-3}$；施加零导数边界条件$\partial\{\rho^{(I)}\phi, \rho, \rho\vec{u}, \rho e, p, \phi\}^T/\partial n = 0$于所有侧面；并令 $\Delta t = 10^{-7}$， $t_f = 2\times10^{-3}$。图12a 展示了随时间演化的界面演化，定性上符合收敛至均匀曲率的预期。图12b 是计算域中随时间演化的质量变化的可视化，由参数

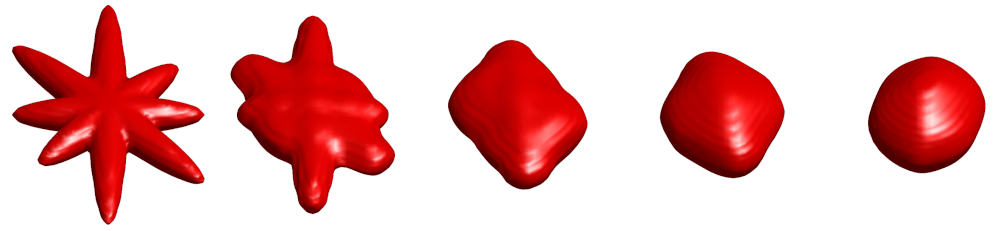
$$\Delta m^k(t/t_f) := \frac{\sum_i \left(\phi^k\rho^k\right)_i \Big|_{t/t_f\in[0,1]}}{\sum_i \left(\phi^k\rho^k\right)_i \Big|_{t=0}} - 1, \quad k \in \{(I), (II), \text{mix.}\} \tag{43}$$

该方法用于追踪两个相以及混合物。如图所示，界面锐化项对相 I 的质量造成了不成比例的扭曲。这是预期之中的，因为系统中的较轻流体在体积分数发生数值变化时会产生更大的百分比偏差。然而，即使此案例旨在构造最坏情况， $\Delta m^k \ \forall \ k$ 的数量级仍可视为可忽略不计。

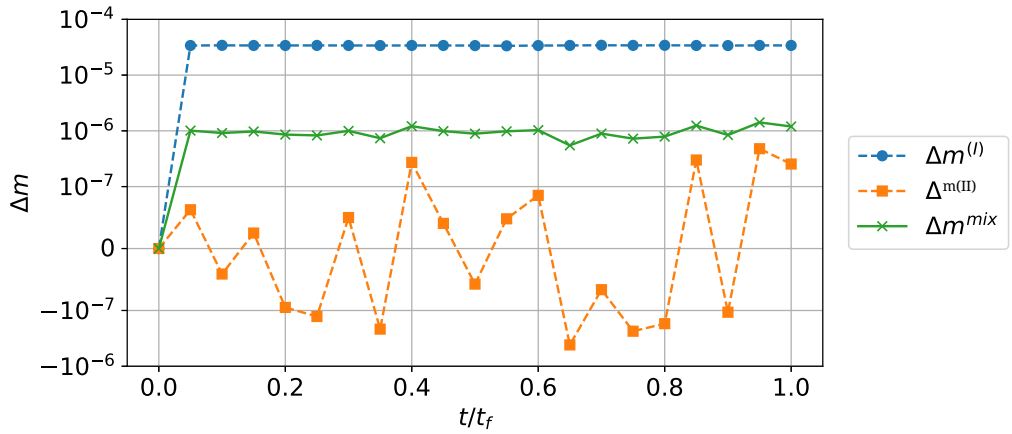
3.1.4.3. 可扩展性。强扩展用于描述求解时间 t_{sim} 如何随处理器核心数量 N_p变化。无量纲加速比指标$t^* = t_{sim}(1)/t_{sim}(N_p)$ 用于量化相对于单个核心而言，使用 N_p 个核心所带来的模拟时间缩短幅度。在此背景下，加速比斜率为 1 表示并行效率达到理想状态，即核心数量加倍会使运行时间减半。相比之下，第3.1.4.2 节所述案例运行了 $N_p = 2^k$， $k \in [0, 6]$ 拟合得到的 t^* 斜率为 0.53，如图13所示。这表明在测试范围内，强扩展效率虽低于线性，但仍相当显著。

3.2. 液滴断裂

在模拟表面张力导致某一相分裂成两个或更多组分的多相流时，模拟能否准确捕捉这一行为，很大程度上取决于能否准确捕捉界面位置。因此，对于涉及液滴断裂的系统，界面锐化与表面张力的结合至关重要。一项广受研究的



(a)



(b)

图12：(*a*) $t \in [0, t_f]$三维形状恢复测试对应的界面演化，显示其定性地收敛为球体。(*b*) 形状恢复测试的质量守恒评估，显示各相及混合物的相对质量偏差 $\Delta m^k = f(t/t_f)$。

问题是次相的剪切速度引起主相变形。剪切会造成波状表面不稳定性，而曲率驱动的表面张力会在这些波的颈部将其切断，使主相中离散的液滴脱离较大的主体，并随次相一同运动。对于表现出这种行为的系统，需要建立一种模型，能够根据两相的物理性质和流动特性，准确捕捉液滴的形状和大小。

液滴破碎的动力学特性可根据韦伯数（$We = \rho^* ||\vec{u}_0||^2_{max} r_0/\sigma$）和奥内佐格数（$Oh = \sqrt{We}/Re$,

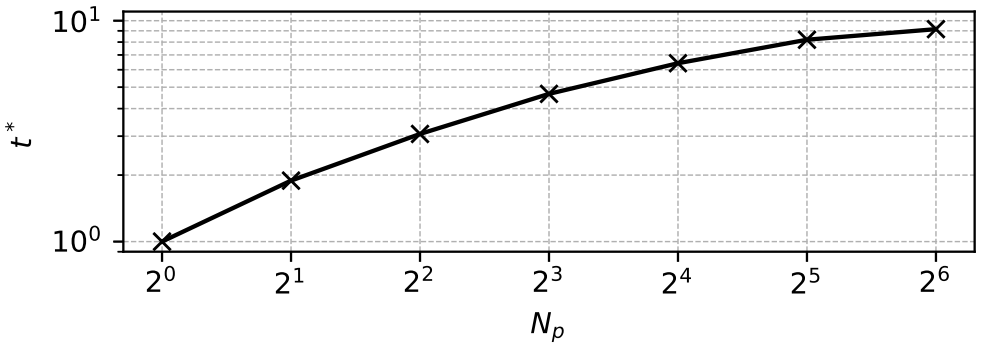


图13：三维形状恢复测试中的强扩展性能。

$Re = \rho^* ||\vec{u}_0||_{max} r_0/\mu^*$），这两个参数概括了黏度（比值 $\mu^* = \mu^{(I)}/\mu^{(II)}$）、动能密度（与密度比$\rho^* = \rho^{(I)}/\rho^{(II)}$）和表面张力（$\sigma$）在主相与次相相互作用中的相对贡献。Schmehl 等人生成了一组多项式 $w_i = f\,(Oh)$，用于描述各种液滴破碎状态 [83]。它们是

$$\begin{cases} We < 12(1 + 1.077Oh^{1.6}) := w_1, & \text{deformation}, \\ w_1 < We < 20(1 + 1.2Oh^{1.5}) := w_2, & \text{bag breakup}, \\ w_2 < We < 32(1 + 1.5Oh^{1.4}) := w_3, & \text{multimodal breakup}, \\ w_3 < We, & \text{shear breakup}, \end{cases} \tag{44}$$

上述液滴行为的二维切片，改编自文献[84], ，如图14所示。

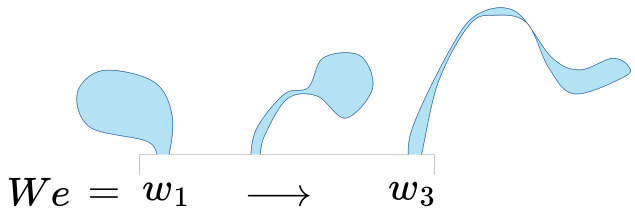


图14：基于 We，Oh 流态的断裂开始时的典型液滴形状。

在 $We \sim w_1$ 时，主相的表面积最小化所需能量远远超过速度剪切使其伸长所需的能量。在这一范围附近，

液滴以固有频率振荡，同时逐渐趋于球形。随着韦伯数向 $w_1 \longrightarrow w_3$ 方向设定，流动受表面张力驱动的程度逐渐降低，受动力学驱动的程度则逐渐提高。与此同时，液滴转变为扁平的丝状形状。对于所有非零且有限的韦伯数，主相在一定程度上会形成由表面张力维系的圆钝尖端，同时也会在一定程度上因动能而发生丝状伸长。按照惯例，这两部分分别称为子液滴和母液滴。本研究量化了这两部分的相对大小，以匹配 Sementilli We中 Oh 所包含的 [85, 86], 组合范围，其输入会导致 $Oh \sim \mathcal{O}(10^{-3})$ $We \sim \mathcal{O}(10^{1})$。

然而，该模型可推广至任意 We, Oh 数。

本研究余下部分将着重比较若干多相模拟结果，这些模拟涉及上述数量级范围，并与式 44所给出的预期液滴行为进行对照。为呈现各种液滴形状，

我们设计了一个案例，其中主相的曲率剧烈波动，并对次相施加横向质量通量。案例的具体设置如下：计算域由 x, $y \in [0, 0.2] = [0, r_0]$ 界定，网格间距为 $h \sim 0.001$ ，采用四边形单元。两相之间界面的初始位置由以下公式确定：

$$f(x) = g(x)h(x) + \frac{y_{max}(1-A)}{2},$$

$$g(x) = \frac{1}{2}Ay_{max}\Big(1 + \sin\Big[\frac{2\pi x}{T_f}\Big]\Big), \quad h(x) = \frac{1}{2}\Big(1 + \text{sign}\Big[\sin\Big\{\frac{\pi x}{T_f} + \frac{\pi}{4}\Big\}\Big]\Big), \quad (45)$$

其中参数为 $T_f = x_{max}/(2N)$、 $N = 4$、和 $A = 0.85$。底部边界设为无滑移条件，即 $||\vec{u}|| = 0$ ；顶部边界设为零梯度条件，即 $\partial\{\rho^{(I)}\phi, \rho, \rho\vec{u}, \rho e, p, \phi\}^T/\partial y = 0$。左右两侧设为周期性边界，以模拟水平方向无限延伸的计算域。计算域其余部分的初始速度场设为 $\vec{u}_0 = \{\min(100, \max[100(y - 0.015)/0.17, 0]) \quad 0\}^T \Rightarrow ||\vec{u}_0||_{max} = 100$，以表示次相剪切。时间步长设为 $\Delta t = 10^{-7}$。最后，表2 列出了本研究测试的各种 We、 Oh 组合。这组测试结果见图 15。

在最高韦伯数下，流动主要受动力学效应支配；因此，断裂起始会延迟，主相得以在长得多的时间内继续伸长。在断裂起始时，

We	Oh	液滴形状描述	ρ^*	$10^3\mu^*$	σ
10	10^{-3}	变形	1.05	6.641	210
15	10^{-3}	袋状破碎	1.05	5.422	140
30	10^{-3}	多模态破碎	1.05	3.834	70
50	10^{-3}	剪切破碎	1.05	2.970	42

表 2：本研究中使用的韦伯数和奥内佐格数及其对应常数 s.

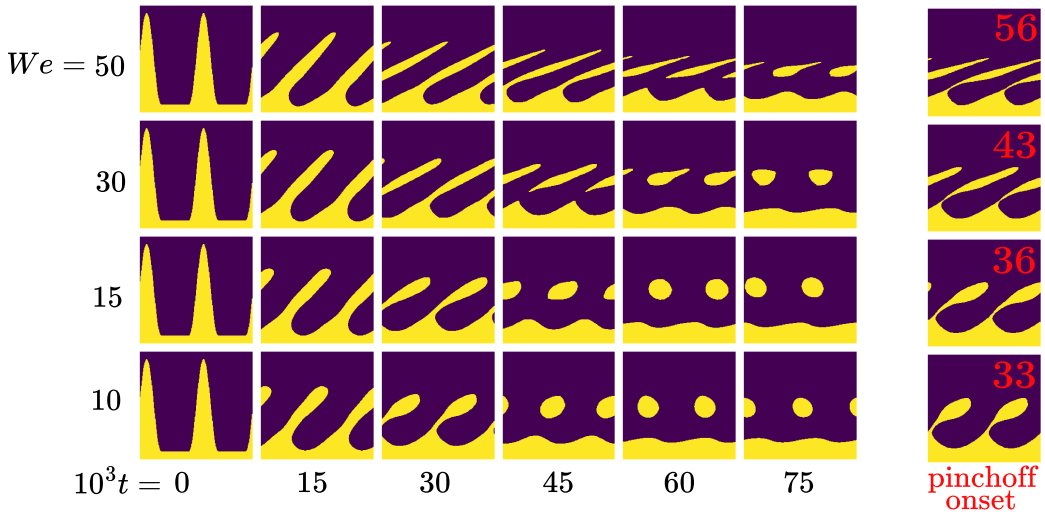


图15： $t = 0$，15，30，45，60，75×10^{-3}时液滴动力学随时间的演变，以及不同韦伯数下断裂起始的时间。

子液滴所占面积远小于母液滴，如图所示。14然而，随着韦伯数降低，表面张力对流动特性的影响变得更加显著，断裂起始也会更快发生。这是因为子液滴会更快地趋于均匀曲率，从而在子液滴底部与母液滴之间形成高度弯曲的区域。由于缩颈速度增大，断裂位置会向计算域底部下移，因此子液滴相对于母液滴的尺寸更大，如图16(a)所示，其中子液滴的面积比为 $A^* = A_{child}/(A_{child} + A_{parent})$。该指标表示归一化质量夹带量，在火箭发动机和流体喷射器 [87, 88], 以及其他应用中具有重要意义。此外，子液滴重新形成均匀曲率，或使其表面积体积比最小化的速率，也

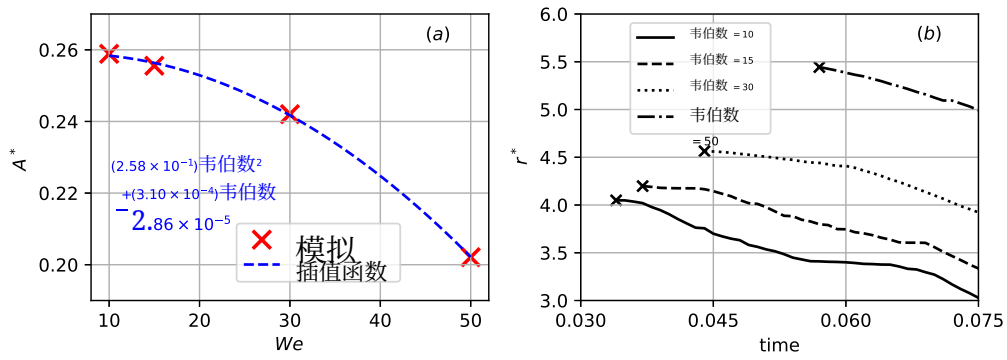


图16: （a）不同韦伯数下断裂起始时的子液滴面积比。蓝线表示至 $R^2 = 0.999$ 的插值函数。（b）不同韦伯数下子液滴半径归一化标准差随时间的演变。

被用作混合效率的度量。因此，一个值得关注的量是界面半径的归一化标准差，r^* 见公式 36。图 16（b）展示了从断裂时刻开始径向偏差随时间逐渐减小的过程。不同韦伯数下，趋向 $r^* \longrightarrow 0$ 的收敛斜率大致相同，但初始偏差取决于表面张力的强度，这一点符合预期，因为高度椭圆形的液滴同时包含高曲率和低曲率区域。

4. 结论

偏微分方程组离散近似固有的数值扩散，在多相流中表现为界面弥散。为减轻这一影响，本研究针对施加于任意构造网格上的含表面张力可压缩多相流系统，提出了一种界面锐化方法。作为验证，结果表明该模型能够准确满足杨-拉普拉斯条件：高压区域由准确定位的锐界面两侧的表面力所界定。此外，将表面张力模块与界面锐化模块结合后，具有振荡表面曲率的星体最终锐化为圆。作为这些模块的实际应用，研究设计了一种界面几何结构，可根据表征剪切流的韦伯数和奥内佐格数产生各种液滴形状。子液滴界面上的曲率偏差

随着韦伯数降低而减小；结果还表明，子液滴面积分数与缩颈速度成正比。这些结果与相关文献一致；因此，本研究提出的模型是一个精确工具，可用于评估任意构造网格上各种可压缩多相流的界面动力学。

5. 致谢

本研究由美国能源部（DoE）国家核安全管理局（NNSA）通过布法罗大学的预测科学学术联盟计划 III（PSAAP III）资助，合同编号为 DE-NA0003961。布法罗大学计算研究中心为本研究提供了支持。作者非常感谢布法罗大学的 Matthew McGurn，并感谢他慷慨相助和提供的宝贵交流。

附录 A. 高斯卷积

第2.1节中引入的高斯分布函数写作

$$G(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}s} e^{-x^2/(2s^2)} \tag{A.1}$$

其中 s 为标准差。显然，$\int_{-\infty}^{\infty} G(x)dx = 1$ 是一个卷积函数，不会导致被卷积场的总面积损失。然而，从计算角度来看，必须对该积分设定有限的界限。因此，了解积分界限的大小与卷积造成的曲线下面积损失量之间的关系就变得十分重要。如果将界限设为标准差的 N 倍，那么

$$\int_{-Ns}^{Ns} G(x)dx = 1 - 10^{-m} \tag{A.2}$$

旨在量化沿积分方向的标准差个数与面积损失数量级之间的关系，m。该方程可简化为

$$N(m) = \sqrt{2}\mathrm{erf}^{-1}(1 - 10^{-m}), \tag{A.3}$$

当误差上限已预先确定时，这一点很有用。在本研究中，规定保留曲线下面积的99%，这对应于 $m = 2 \rightarrow N \approx 2.6$。（保留面积的99.9%需要 $m = 3 \rightarrow N \approx 3.3$，等等。）

平滑范围由标准差 s 的大小量化。令 $s = Ch$，其中 h 是网格间距尺度，C 是一个常数（本研究中选取 $C = 1$ ）。那么卷积所跨越的单元层数 $\mathscr{L}$ 必须满足以下关系

$$\mathscr{L} = \left\lceil \frac{Ns}{h} \right\rceil = \lceil CN \rceil, \tag{A.4}$$

其中，上取整符号表示向上取整算子。

选定标准差大小（C 使得 $s = Ch$）以及卷积范围所覆盖的标准差个数（N见公式 A.3）后，即可通过公式 A.4计算平滑涉及的单元层数。这样做很有用，因为可以在平滑之前识别出体积分数界面周围 $\mathscr{L}$层范围内的掩膜。随后，高斯平滑算法仅会为掩膜覆盖的单元赋予非零值。这样可以避免在距离界面足够远的单元上计算界面锐化项。

参考文献

[1] P.-G. Gennes, F. Brochard-Wyart, D. Quéré 等，《毛细现象与润湿现象：液滴、气泡、珍珠、波》，Springer，2004年。[2] J. Eggers, J. E. Sprittles, J. H. Snoeijer，《聚并动力学》，《流体力学年度评论》57（2024年）。[3] C.-C. Hsu, P.-H. Chen，《纳米颗粒涂层的表面润湿性对沸腾传热临界热流密度的影响》，《国际传热与传质杂志》55（13-14）（2012年）3713–3719。[4] J. Kim, S. Jun, R. Laksnarain, S. M. You，《具有中等润湿性的加热表面粗糙度对池沸腾传热的影响》，《国际传热与传质杂志》101（2016年）992–1002。

[5] D. Dendukuri, K. Tsoi, T. A. Hatton, P. S. Doyle, 《利用微流控技术控制合成非球形微粒》, Langmuir 21（6）（2005年）2113–2116。[6] H. Tanaka, 《二元流体混合物中润湿与相分离的相互作用：流体动力学的作用》, 《物理学杂志：凝聚态》13（21）（2001年）4637。[7]J. J. Marziale, J. Sun, E. A. Walker, Y. Chen, D. Salac, J. Chen, 《化学气相渗透工艺参数对多孔 α-SiC弯曲强度的影响：数值模型》, 《美国陶瓷学会志》（2024年）1–17。[8] M. J. Berger, J. Oliger, 《双曲偏微分方程的自适应网格加密》, 《计算物理学杂志》53（3）（1984年）484–512。[9] M. J. Berger, P. Colella, 《冲击流体动力学的局部自适应网格加密》, 《计算物理学杂志》82（1）（1989年）64–84。[10] X. Chen, V. Yang, 《针对含薄区域多相流模拟的基于厚度的自适应网格加密方法》, 《计算物理学杂志》269（2014年）22–39。[11] J. M. Rodriguez, O. Sahni, R. T. Lahey Jr, K. E. Jansen, 《用于多相流数值模拟的并行自适应网格方法》, 《计算机与流体》87（2013年）115–131。[12] L. C. Ngo, H. G. Choi, 《用于非结构网格上多相流水平集模拟的多层次自适应网格加密方法》, 《国际工程数值方法杂志》110（10）（2017年）947–971。[13] D. Salac, M. Miksis, 《一般流场中脂质囊泡的水平集投影模型》, 《计算物理学杂志》230（22）（2011年）8192–8215。[14] D. Salac, 《一种通用的质量守恒纳维–斯托克斯投影方法》, 《计算机物理通讯》204（2016年）97–106。

[15] Y. Zeng、H. Liu、Q. Gao、A. Almgren、A. P. S. Bhalla、L. Shen，适用于高密度比和高雷诺数两相不可压缩流的协调自适应水平集框架，《计算物理学杂志》478（2023）111971。[16] D. P. Enright，粒子水平集方法在增强自由表面流分辨率中的应用，斯坦福大学，2002年。[17] Z. He、S. Tan，通用五方程模型中材料界面不混溶性保持条件，《计算物理学杂志》（2024）113192。[18] Q. Li、F. Dong、L. K. Li，采用自适应网格加密的界面锐化方法，用于两相可压缩流的流体体积法模拟，《计算机与流体》210（2020）104648。[19]V.-T. Nguyen、W.-G. Park，用于两相不可压缩流的流体体积法（VOF）界面锐化方法，《计算机与流体》152（2017）104–119。[20] K. So、X. Hu、N. A. Adams，两相可压缩流模拟的反扩散界面锐化技术，《计算物理学杂志》231（11）（2012）4304–4323。[21] A. N. Sambe、D. Sous、F. Golay、P. Fraunié、R. Marcer，带宏观粗糙度的数值波浪破碎，《欧洲力学杂志 B/流体》30（6）（2011）577–588。[22]Z. Zhao、J. Rong、S. Zhang，用于水下爆炸模拟的界面锐化技术，《海洋工程》266（2022）112922。[23] Z. Barbeau、S. Lele，两相剪切层数值方法评估，载于：AIAA 航空论坛与 ASCEND 2024，2024，第3790页。[24]R. Shah，液滴式打印中流动与铺展行为的多相建模：生物打印中的应用与验证，博士论文，北卡罗来纳州立农业技术大学（2023）。

[25] J. Sun、J. J. Marziale、A. S. Haselhuhn、D. Salac、J. Chen，通过直接墨水书写实现短纤维增强陶瓷基复合材料的集成计算材料工程框架，《材料科学与工程中的建模与模拟》32（2）（2024）025007。[26] J. Sun、Y. Chen、J. J. Marziale、E. A. Walker、D. Salac、J. Chen，采用热力耦合断裂模型预测烧结 α-SiC的损伤，《美国陶瓷学会志》106（10）（2023）6036–6050。[27] J. W. Talbot，超声速和亚声速横流中的充气射流与纯液体射流数值研究，北卡罗来纳州立大学，2020年。[28] S. Hardt、F. Wondra，基于源项连续场表示的界面流蒸发模型，《计算物理学杂志》227（11）（2008）5871–5895。[29] Y. Sato、B. L. Smith、B. Niceno，采用应用于核态沸腾、偏离核态沸腾和膜态沸腾的界面追踪方法进行池沸腾模拟的示例，载于：《两相传热与流动百科全书 III：宏观与微观流动沸腾及数值建模基础》第1卷：数值建模方法，世界科技出版公司，2018年，第225–263页。[30] K. E. Wardle、H. G. Weller，用于液液萃取中分散流/分离流耦合的混合多相CFD求解器，《国际化学工程杂志》2013（1）（2013）128936。[31]D. M. Anderson、G. B. McFadden、A. A. Wheeler，流体力学中的扩散界面方法，《流体力学年度评论》30（1）（1998）139–165。[32] A. Lamorgese、R. Mauri、L. M. C. Sagis，软界面主导系统的建模：相场模型与吉布斯分割面模型的比较，《物理学报告》675（2017）1–54。[33] G. Soligo、A. Roccon、A. Soldati，用于湍流多相流模拟的质量守恒改进型相场方法，《Acta Mechanica》230（2019）683–696。

[34]Q. Li, L. Fu, 《基于弥散界面方法的可压缩多相流TENO-THINC-MOOD格式族》, 《计算物理学杂志》519（2024年）113375。[35] Q. Li, Y. Lv, L. Fu, 《采用TENO-THINC格式的可压缩多相流高阶弥散界面方法》, 《国际多相流》173（2024年）104732。[36] Y. Sun, C. Beckermann, 《利用相场方程进行锐界面追踪》, 《计算物理学杂志》220（2）（2007年）626–653。[37] J. A. Sethian等, 《水平集方法与快速行进方法》, 第98卷, 剑桥大学出版社, 1999年。[38] S.Osher, R. Fedkiw, K.Piechor, 《水平集方法与动态隐式曲面》, 《应用力学评论》57（3）（2004年）B15–B15。[39] R. Folch, J. Casademunt, A. Hernández-Machado, L. Ramirez-Piscina, 《具有任意黏度差异的赫尔-肖流相场模型：I. 理论方法》, 《物理评论E》60（2）（1999年）1724。[40] W. J. Boettinger, J. A. Warren, C. Beckermann, A. Karma, 《凝固的相场模拟》, 《材料研究年度评论》32（1）（2002年）163–194。[41] P.-H. Chiu, Y.-T. Lin, 《用于求解不可压缩两相流的守恒相场方法》, 《计算物理学杂志》230（1）（2011年）185–204。[42] S. S. Jain, 《用于两相流模拟的高精度守恒相场方法》, 《计算物理学杂志》469（2022年）111529。[43] S. Mirjalili, C. B. Ivey, A. Mani, 《具有可证明有界性的两相流守恒弥散界面方法》, 《计算物理学杂志》401（2020年）109006。[44] A. Kyrkos, J. A. Ekaterinaris, 《用于NH90机身旋翼计算流体力学预测的非结构网格方法评估》, 《航空航天科学与技术》19（1）（2012年）77–85。

[45] A. Bhadauria, B. Dorschner, I. Karlin, 《用于流固耦合可压缩流的格子玻尔兹曼方法》, 《流体物理》33（10）（2021年）。[46] M. D. Jackson, J. L. Gomes, P. Mostaghimi, J. R. Percival, B. S. Tol-lit, D. Pavlidis, C. C. Pain, A. H. El-Sheikh, A. H. Muggeridge, M. J. Blunt, 《利用曲面、自适应非结构网格和控制体积有限元方法进行流动模拟的油藏建模》, 载于：SPE油藏模拟会议，SPE，2013年，第SPE–163633页。[47] Z. Xie, 《复杂地形上三维破碎波的两相流模型》, 《英国皇家学会会刊A辑：数学、物理与工程科学》471（2180）（2015年）20150101。[48] W.-H. Tsao, R. Schurr, C. E. Kees, 《自然岸线上波浪变形的高阶相位解析方法》, 载于：国际海洋工程与北极工程会议，第86878卷，美国机械工程师学会，2023年，第V005T06A003页。[49] H. Hwang, S. S. Jain, 《非结构网格上两相流的稳健相场方法》, 《计算物理学杂志》507（2024年）112972。[50] M. Jiang, X. Tao, W. Chen, Z. Dai, 《复杂网格上可压缩多相流水下爆炸精确模拟的增强型界面锐化算法》, 《流体物理》37（1）（2025年）。[51]N. Tonicello, M. Ihme, 《基于间断伽辽金框架的两相可压缩流模拟高阶扩散界面方法》, 《计算物理学杂志》508（2024年）112983。[52] W. Rider, D. Kothe, 《拉伸与撕裂界面追踪方法》, 载于：第12届计算流体力学会议，1995年，第1717页。[53] W. J. Rider, D. B. Kothe, 《重构体积追踪》, 《计算物理学杂志》141（2）（1998年）112–152。[54] J. Lopez, J. Hernandez, 《一般网格中三维流体体积法的解析与几何工具》, 《计算物理学杂志》227（2008年）5939–5948。

[55] S. Diot、M. M. Francois，基于解析公式的三维任意凸单元界面重构方法，《计算物理学杂志》305（2016年）63–74。[56] D. Dai、A. Tong，PLIC-VOF方法中面向三维多面体非结构网格的解析界面重构算法，《国际流体数值方法杂志》91（2019年）213–227。[57] J. Lopez、J. Hernandez、P. Gomez、F. Faura，用于VOF方法中体积截断、初始化与守恒强制的非凸解析与几何工具，《计算物理学杂志》392（2019年）666–693。[58] J. Lopez、J. Hernandez，任意网格上非分裂几何流体体积方法中基于半空间与超平面的多胞体求交，《计算物理学通讯》300（2024年）109167。[59] J. Lopez、J. Hernandez，GVOF：面向任意网格非分裂几何流体体积方法的开源软件包，《计算物理学通讯》277（2022年）108400。[60]J. Lopez，任意网格上复杂界面分段线性重构的等值面提取，《计算机方法在应用力学与工程中的应用》425（2024年）11695。[61] F. Xiao、Y. Honma、T. Kono，一种使用双曲正切函数的简单代数界面捕捉格式，《国际流体数值方法杂志》48（9）（2005年）1023–1040。[62] B. Xie、F. Xiao，面向任意混合非结构网格的高效精确界面捕捉：采用二次曲面表示与高斯求积的THINC方法，《计算物理学杂志》349（2017年）415–440。[63]D. Chen、B. Xie、F. Xiao，再论THINC/QQ格式：提升精度与鲁棒性的最新进展，《国际流体数值方法杂志》94（7）（2022年）719–755。[64] D. Chen、X. Tong、B. Xie、F. Xiao、Y. Li，基于THINC格式与自适应网格加密的精确高效多相求解器，《国际多相流》162（2023年）104409。

[65] H. Wakimura、T. Aoki、F. Xiao，一种基于边界变差递减原理的低耗散数值方法，用于非结构网格上含相变的可压缩气液两相流，《流体物理》37（1）（2025年）016103. doi:10.1063/5.0183302.[66] D. Kim、C. B. Ivey、F. E. Ham、L. R. Bravo，一种在非结构网格上具有低数值扩散的高效高分辨率流体体积法，《计算物理学杂志》446（2021年）110606. doi:10.1016/j.jcp.2021.110606.[67]E. M. Adebayo、P. Tsoutsanis、K. W. Jenkins，可压缩多相流弥散界面捕捉方法综述，《流体》10（4）（2025年）93。[68] M. L. Sementilli、M. T. McGurn、J. Chen，采用分层流模型的可扩展可压缩流体体积求解器，《国际流体数值方法杂志》95（5）（2023年）777–795。[69] G. Gomez，以方差表示的局部光滑性：自适应高斯滤波器.，见：BMVC，第2000卷，Citeseer，2000，第1–10页。[70] J. U. Brackbill、D. B. Kothe、C. Zemach，一种模拟表面张力的连续介质方法，《计算物理学杂志》100（2）（1992）335–354。[71] S. Balay、W. D. Gropp、L. C. McInnes、B. F. Smith，面向对象数值软件库中并行性的高效管理，载于：E. Arge、A. M. Bruaset、H. P. Langtangen（编），《科学计算中的现代软件工具》，Birkhäuser出版社，1997，第163–202页。[72] S. Balay、S. Abhyankar、M. F. Adams、S. Benson、J. Brown、P. Brune、K. Buschelman、E. M. Constantinescu、L. Dalcin、A. Dener、V. Eijkhout、J. Faibussowitsch、W. D. Gropp、V. Hapla、T. Isaac、P. Jolivet、D. Karpeev、D. Kaushik、M. G. Knepley、F. Kong、S. Kruger、D. A. May、L. C. McInnes、R. T. Mills、L. Mitchell、T. Munson、J. E. Roman、K. Rupp、P. Sanan、J. Sarich、B. F. Smith、H. Suh、S. Zampini、H. Zhang、H. Zhang、J. Zhang，PETSc/TAO用户手册，技术报告 ANL-21/39 - Revision 3.22，阿贡国家实验室（2024年）. doi:10.2172/2205494.

[73] S.Balay, S. Abhyankar, M. F. Adams, S. Benson, J. Brown, P. Brune,K. Buschelman, E. M. Constantinescu, L.Dalcin, A. Dener, V. Ei-jkhout, J. Faibussowitsch, W. D.Gropp, V. Hapla, T. Isaac, P. Jolivet,D. Karpeev, D. Kaushik, M. G.Knepley, F. Kong, S. Kruger, D. A.May, L. C. McInnes, R. T. Mills, L.Mitchell, T. Munson, J.E. Ro-man, K. Rupp, P.Sanan, J. Sarich, B.F. Smith, S.Zampini, H. Zhang,H.Zhang, J.Zhang, PETSc网页，https://petsc.org/（2025年）。网址 https://petsc.org/[74] N. R. Morgan, J. I. Waltz, 自适应网格加密下四面体网格上演化前沿的三维水平集方法，《计算物理学杂志》336 (2017) 492–512。[75] Z. Jibben, J. Velechovsky, T. Masser, M. M. Francois, 在自适应加密网格上模拟可压缩流动中的表面张力，《计算机与应用数学》78 (2) (2019) 504–516。[76] M.-S. Liou, C. J. Steffen Jr，一种新的通量分裂格式，《计算物理学杂志》107 (1) (1993) 23–39。[77] M.-S. Liou，AUSM 的后续工作：Ausm+，《计算物理学杂志》129 (2) (1996) 364–382。[78] M.-S. Liou，AUSM 的后续工作，第二部分：适用于+全速度的 Ausm-up，《计算物理学杂志》214 (1) (2006) 137–170。[79]S. T. Zalesak，适用于流体的全多维通量修正输运算法，《计算物理学杂志》31 (3) (1979年) 335–362。[80] Y. Zu, A. Li, H. Wei，基于 Allen-Cahn 方程的二元流体系统界面追踪相场格子玻尔兹曼模型，《物理评论E》102 (5) (2020年) 053307。[81] M. Shen, B. Q. Li，一种用于移动接触线问题的增强型守恒相场方法，《国际流体数值方法杂志》96 (7) (2024年) 1215–1229。[82] K. Vijay, R. Kumar, J. Banerjee 等，捕捉锐界面的代数型流体体积格式比较评估，载于：

流体力学与流体动力学会议，Springer，2025年，第51–64页。[83] R. Schmehl, G. Maier, S. Wittig，贫预混燃烧器预混管道中燃料雾化、二次液滴破碎及喷雾扩散的计算流体力学分析，载于：第八届国际液体雾化与喷雾系统会议，2000年，页码–。[84] S. S. Jain, N. Tyagi, R. S. Prakash, R. V. Ravikrishna, G. Tomar，中等韦伯数下液滴的二次破碎：密度比和雷诺数的影响，《国际多相流》117 (2019年) 25–41。[85] M. L. Sementilli, M. A. Schulwitz, P. Pakseresht, J. M. Chen，涡脱落对混合火箭燃料液层界面失稳的影响，载于：AIAA SCITECH 2022论坛，2022年，第2230页。[86] K. Budzinski, S. S. Aphale, E. K. Ismael, G. Surina III, P. E. DesJardin，混合火箭发动机分析中所用烧蚀边界层燃烧理论的辐射传热，《燃烧与火焰》217 (2020年) 248–261。[87] O. Klyus, M. Szczepanek, G. Kidacki, P. Krause, S. Olszowski, L. Chybowski，内燃机喷嘴针阀轮廓对燃料雾化质量的影响，《能源》17 (1) (2024年) 266。[88] J. Khakimov, Z. Musabekov, F. Rakhmatova，改善汽车发动机雾化燃料射流的特性，载于：E3S会议网络，第525卷，EDP Sciences，2024年，第05015页。