arXiv:2611.29053v1 [physics.flu-dyn] 21 Nov 2026

速度驱动混合的分形维数：对 Cao 等人（1992）的重新分析及 Marstrand 余维规则的普适性

Rod W. Douglass[1]、* 和 Steven R. Dunbar[2]
[1] *Douglass Research & Development LLC* [2] *Department of Mathematics, University of Nebraska–Lincoln (Professor Emeritus)*（日期：2026年11月24日）

Cao *et al.* [《物理评论A》**45**，3841（1992）] 比较了由连续介质和分子动力学（MD）模拟生成的界面的盒计数分形维数。这些模拟研究的是由随机速度扰动而非重力加速度驱动的零Atwood数（$A \equiv (\rho_h - \rho_l) / (\rho_h + \rho_l) = 0$）类瑞利–泰勒混合。他们报告称，不同物理模型所得数值总体相近（$D \sim 1.1$–1。4）。我们使用网格收敛的流体体积法（VOF）模拟和现代盒计数算法重新审视了他们的结果。网格收敛的连续介质维数取决于初始条件实现（$D = 1.13$–1。38）。重新提取他们的分子动力学界面得到$D = 1.373$。独立的 LAMMPS 模拟（12 000–500 000 个原子）表明，分子动力学维数测量的是原子位置的热散布，而非界面几何，因为 Cao 的盒计数窗口（盒边长为 $\ell = 0.8$–2.5σ，其中 σ 为 Lennard–琼斯长度尺度）低于界面结构的尺度。$t = 0$ 处的平坦界面给出相同的 $D \approx 1.36$。在更大的盒尺寸（$\ell = 3$–50σ）下，D 确实会随时间增加，从而捕捉到不断增强的界面起伏；但对于平坦界面，其初始值为 1。59，远高于 $D = 1.0$，原因是中点云的热厚度在所有可达尺度上都会污染测量结果。因此，在原子尺度上，连续介质维数和分子动力学维数测量的是不同的物理量——前者是界面几何，后者是热噪声。当通过将中点云缩减为一维曲线（在 2σ处进行中位数分箱）来滤除热散布后，分形维数轨迹会收敛到与连续介质相同的晚期值（$D \approx 1.43$），从而恢复被原子尺度盒计数法原始结果所掩盖的跨模型普适性。

我们证明，线性阶段瑞利–泰勒界面的盒计数维数在 $A > 0$ 处恰为$D = 2 - \beta$，在 $A = 0$处恰为 $D = \frac{5}{2} - \beta$；其中，β 是初始速度扰动的谱衰减指数；半单位偏移量是由瑞利–泰勒增长率因子 $\sqrt{n}$ 贡献的利普希茨指数。对于 Cao（$\beta = 0$）所采用的白噪声初始条件，这两个公式均超出了其有效范围（所依据的随机级数并不收敛），因此该定理不作出任何预测。Cao *et al.* 报告的早期 $D \approx 2$ 是盒计数边界伪影。冻结非线性维数——即初始速度场衰减且 D 不再变化后达到的晚期值——取决于初始条件实现（例如，在 450×450处为 $D = 1.21$），并反映了非线性平流使界面偏离其初始白噪声特征的程度。

我们对速度驱动混合界面进行了三维网格收敛性研究，在最高分辨率下得到 $D_{3\mathrm{D}} = 2.361 \pm 0.002$（$400 \times 400 \times 200$）。Marstrand 余维规则 $D_{3\mathrm{D}} = D_{2\mathrm{D}} + 1$ 显示出 7% 的差异，这反映了 $D_{2\mathrm{D}}$ 在$A = 0$ 处对初始条件实现的依赖性。先前的 Rayleigh–Taylor结果 [1, 2] 在同样未匹配的比较中给出 2.8–6.5%，且随着三维网格逐渐加密，这一差异会减小。因此，$A = 0$ 的不同之处不在于差异的大小，而在于差异不会随分辨率变化。对于速度搅拌情形，要进行确凿的检验，必须使用匹配的初始条件实现。

I. 引言

Cao等人 [3] 比较了由零Atwood数（$A \equiv (\rho_h - \rho_l)/(\rho_h + \rho_l) = 0$）类瑞利–泰勒混合产生的界面的盒计数分形维数。该混合由随机速度扰动驱动，而非由重力加速度驱动；研究采用了连续介质（SOLA-VOF [4]）和分子动力学（MD）模拟。他们报告称，连续介质模拟的结果为 $D \sim 1.1$–1.4，分子动力学模拟的结果为$D = 1.357$，由此得出结论：不同物理模型中的界面几何形态“粗略而言相同”——这是早期证据，表明分形维数取决于混合机制，而非微观物理。

三十年后，Cao等人的研究结果值得重新审视。他们的连续介质模拟采用的网格为 60×60至 120×120 个网格单元——远低于如今的常规水平——且报告的分形维数随分辨率大幅波动，始终未能达到收敛值。他们的盒计数算法缺少边界修正，导致早期出现 $D \approx 2$ 伪影，而他们却将其解释为真实的连续介质维数。此外，他们的研究仅限于二维；并未报告速度驱动混合界面的三维测量结果。

缺少三维测量之所以重要，是因为有一项几何检验，Cao等人若无三维数据便无法进行：Marstrand余维定理 [5–7]。对于一个分

嵌入于 $\mathbb{R}^3$ 中并具有各向同性自相似性的集合，其一般余维一切片的豪斯多夫维数

* rwdlanm@gmail.com

满足 $D_{3\mathrm{D}} = D_{2\mathrm{D}} + 1$。Sreenivasan [8] 通过实验观察到这一+1 规则适用于湍流射流中的被动标量界面及尾流（$D_{2\mathrm{D}} \approx 1.36$、 $D_{3\mathrm{D}} \approx 2.35$），并将其解释为湍流标量界面具有各向同性自相似性的证据。近来研究表明，对于阿特伍德数范围为 0.002 至0.60 [1, 2]的浮力驱动瑞利–泰勒不稳定性（RT）界面， +1 规则同样成立：在网格间距匹配时，偏差为 0.6–4.5%；若每种维数均采用各自最精细的网格，偏差则为 2.8–6.5%。在这些情形中，二维和三维中的不稳定机制相同——气泡竞争、并合级联以及次级开尔文–亥姆霍兹不稳定性。

对于速度驱动混合， +1 检验并非简单。在二维中，涡旋拉伸在几何上不可能发生，能量级联方向也会逆转：Kraichnan [9]指出，二维湍流会出现向大尺度传递的逆能量级联，这与三维湍流中的正向能量级联相反。因此，二维速度驱动混合模拟并非三维问题的余维一切片，而是具有不同谱输运特性的另一种动力系统。这种动力学不对称性是否会影响 +1 规则，尚未经过检验。

我们使用网格分辨率最高达 1000×1000 的几何流体体积法模拟，重新研究 Cao问题，得到一个冻结的分形维数——即衰减中的速度场不再重塑界面后达到的晚期 D ——其数值取决于初始速度实现。三种受控的初始条件（IC）方案得到收敛值 $D = 1.13$、1.21 和 1.38，表明在 $A = 0$ 不存在分形吸引子；这与浮力驱动瑞利–泰勒不稳定性形成对比，后者的 $D \approx 1.71$ 不受初始条件影响。在匹配条件下（将 450^2 速度场插值到更精细的网格上），连续介质维数收敛至 $D = 1.21$，远低于重新提取的分子动力学维数 $D = 1.37$。独立的 LAMMPS [10] 模拟证实，分子动力学维数衡量的是原子位置的热涨落，而非界面几何（第 V C 节），因此这两个量并无关联。

我们证明，线性阶段瑞利–泰勒界面的盒计数维数恰为 $D = 2 - \beta$ （当$A > 0$ 时）和 $D = \frac{5}{2} - \beta$ （当 $A = 0$时），其中 β 是初始速度扰动的谱衰减指数。对于白噪声初始条件（$\beta = 0$），该级数不收敛，因此定理不作任何预测。Cao 报告的早期 $D \approx 2$ 是盒计数边界伪影，并非正确的物理预测。我们进行了三维网格收敛性研究，发现三种分辨率（$150 \times 150 \times 75$至 $400 \times 400 \times 200$）下的 $D_{3\mathrm{D}} \approx 2.36$ 均为如此。Marstrand +1 检验显示存在 7% 的差异，这反映了 $A = 0$时 $D_{2\mathrm{D}}$ 对初始条件实现的依赖。在同样未匹配的比较中，先前的瑞利–泰勒不稳定性结果给出的差异为 2。8–6。5%，且随着三维网格细化而减小；被动标量的差异则保持在 1%。 $A = 0$ 的独特之处在于，其差异在每种网格上都相同，因此速度搅拌情形需要匹配的初始条件实现，才能进行确定性检验。

II. 方法

A. 连续介质模拟

所有连续介质模拟均采用 OpenFOAM基金会提供的 OpenFOAM v13，使用 incompress-ibleVoF 求解器和多切割MPLIC界面格式——这是一种符合参考文献 [11] 所述的分段线性界面计算——该格式会在每个单元内计算 $F = 0.5$ 等值面的分段线性近似。两种流体的密度相同，均为 $\rho = 1000$ kg/m^3，运动黏度均为 $\nu = 10^{-5}$ m^2/s，因此 $A = 0$；以初始峰值速度$V_{\max} = 0.05$ m/s 和计算域宽度 $L = 1$ m 为基准的雷诺数 Re 为 $= V_{\max}L/\nu = 5000$。表面张力为零。不使用湍流模型。

二维模拟在边长为 $1.0 \times$1.0 m 的方形域上进行，采用六种分辨率，网格单元数从 150×150 至 1000×1000 （$\Delta x = 6.67$ 至 1.00 mm）。主要的收敛性研究使用三种网格（150^2, 300^2, 450^2）；另外三种网格（$600^2, 800^2, 1000^2$）用于初始条件敏感性研究（第 IV D 节）。边界条件为 x 方向周期性，顶部和底部自由滑移。平坦界面初始化于 $y_0 = 0.5$ m 处，并设置为锐利的 VOF 场（$F = 1$以下，$F = 0$ 以上），其中 $F(\boldsymbol{x},\ t)$ 是下层流体的体积分数（两种流体在 $A = 0$ 时相同；此处的标记仅为惯例）。速度场在整个计算域内初始化为由快速傅里叶变换生成的带限随机场：将白噪声变换到波数空间，经过滤波后保留波长介于 $4\Delta x$ 和 $L/2$ 之间的分量，再变换回原空间。在 $4\Delta x$ 处设置短波长截断，以抑制网格尺度的振荡；长波长截断则用于防止计算域尺度晃荡。将该场缩放至峰值大小为 $V_{\max}$，并使用固定的随机种子，以确保可重复性。

三维模拟使用一个 $1.0 \times 1.0 \times$0.5 m 的计算域，分辨率有三种：$150 \times 150 \times 75$(1.69 $\times 10^6$ 个网格单元，$\Delta x = 6.67$ mm)、 $300 \times 300 \times 150$(13.5 $\times 10^6$ 个网格单元， $\Delta x = 3.33$ mm) 和 $400 \times 400 \times 200$(32 $\times 10^6$ 个网格单元， $\Delta x = 2.5$ mm)，网格间距均为各向同性。 x 和 z 方向采用周期性边界条件，顶部和底部采用自由滑移边界条件。速度初始条件需要特殊处理，因为随机三维速度场通常并非无散。我们分三步生成初始速度：

1. 在傅里叶空间中生成三个独立的带限白噪声实现 $\hat{u}_i(\boldsymbol{k})$，并滤波至 $4\Delta x \le \lambda \le L_z/2 = 0.25$ m。上截止为计算域最短维度的一半，因此此处为 0.25 m；而计算域为正方形的二维情形中，上截止为 0.5 m。

2. 应用Leray投影算子以强制执行 $\nabla \cdot \boldsymbol{u} = 0$:

$$\hat{u}_i^{\mathrm{sol}} = \hat{u}_i - k_i \frac{k_j \hat{u}_j}{|\boldsymbol{k}|^2}, \tag{1}$$

其中， $\boldsymbol{k}$ 是波矢，并且默认对 j 求和。这会减去每个傅里叶模态的无旋分量。

3. 变换回物理空间，并缩放至最大值 $|\boldsymbol{u}| = V_{\max}$。

该投影在谱空间中是精确的：残差 $\max|\boldsymbol{k}\cdot\hat{\boldsymbol{u}}|$ 处于舍入误差范围内，按构造本就如此。这检验的是投影，而不是对求解器所见散度的测量；求解器所见的散度是有限体积算子作用于插值到单元中心后的场所得结果，该值很小但并非为零。求解器会在第一个时间步之前，通过初始 pcorr 投影消除剩余散度。此过程是二维流函数的自然三维推广，可生成具有受控谱支撑的随机无散速度场。

动量采用 linearUpwind 格式进行平流，VOF场则采用带多项式子循环的 MPLIC。时间积分采用一阶欧拉法，并使用自适应时间步进（最大库朗数为 0.5）。数值模拟分别运行至 $t = 50$ s（二维）和 $t = 20$–25 s（三维，取决于分辨率；见第 IVB 节），每隔 0.2 s 写出一次场。

B. 分子动力学数据重新提取

既没有 Cao 等人使用的原始 MD 原子坐标数据，也无法获取其 MD 代码。因此，我们从原始论文的图中重新提取 MD 界面几何（本小节），并使用 LAMMPS 独立进行 MD 模拟（第二节 C）。在两幅相关图中，参考文献 [3] 的图 2 以整洁的点标记绘出混合区中点，且没有原子尺度噪声，因此保真度更高。我们以 600 每英寸点数渲染该图，检测坐标轴边界框，并提取出 703 个物理坐标中的点质心。对这些中点进行盒计数分析（第二节 D），得到 $D = 1.373$，其 $R^2 = 0.984$ 在 1.41 个数量级的尺度范围内，与已发表的 1.357 相差 0.016。微小差异归因于此处采用的边界修正和拟合算法。

我们还从图 1(a) 中提取界面，该图展示了包含原子的完整 MD 快照。骨架化（将栅格化边界形态学细化为单像素宽曲线）后，盒计数法得到$D = 1.30$，比图 2 的数值低 0.07，这是栅格线宽伪影所致。图 2 中的提取基于质心位置，而非像素边界，因此估计更可靠，本文均采用该结果。

C. LAMMPS 分子动力学模拟

为获得一组新的二维和三维 MD 数据，以便与连续介质结果进行比较，并确定 MD 盒计数法维数实际测量的是什么，我们使用 LAMMPS [10]进行了独立模拟。该设置再现了 Cao 等人配置的主要特征：一个纵横比为 2:1 的二维矩形计算域，

Lennard-Jones 6-12 相互作用（$\varepsilon = \sigma = 1$ 约化单位，截断值为 $r_c = 2.5\sigma$），原子质量为 $m = 16$ amu（采用 Cao 的设定，质量小于氩，以加快动力学过程），以及沿周边分布的重型冻结壁面原子。流体原子按数密度 $\rho = 0.85\,\sigma^{-2}$排列在三角晶格上，底半部分标记为类型 1，顶半部分标记为类型 2。在 $A = 0$，这两种原子完全相同（质量和势能均相同），因此，单盒初始化在物理上等同于 Cao 所采用的双半盒流程。

初始速度根据约化温度为 $T^* = k_B T/\varepsilon$ =2.5 的麦克斯韦–玻尔兹曼分布抽取（类氩 LJ 系统中为≈ 300 K），其中 k_B 为玻尔兹曼常数；随后在时间步为 $\Delta t = 0.002\,\tau_{\mathrm{LJ}}$ 的条件下进行 NVT系综（粒子数、体积和温度恒定；Nos´e–Hoover 恒温器）平衡，其中 LJ时间单位为 $\tau_{\mathrm{LJ}} = \sigma\sqrt{m/\varepsilon}$ ——最小系统进行 50 000 步，另外四个较大系统进行 100 000 步；更长的平衡时间是熔化较大晶格所必需的。约化时间为 $t^* = t/\tau_{\mathrm{LJ}}$。请注意，数值模拟采用约化 Lennard-Jones单位运行，其中流体原子的质量为 1；Cao等人的 16 a.u. 仅用于将 t^* 转换为物理时间，与本文报告的动力学无关。共采用五种系统尺寸，流体原子数从 12 000 到 500 000 不等（11 881、25 289、50 065、100 618 和 503 821）；并在中等尺寸系统中测试了 $T^* = 1.0$、2.5 和 5.0 的温度。按照 Ar-Ar 映射（$\varepsilon/k_B \approx 120$ K），这些温度分别对应 120、300 和 600 K；相较于 Cao 的 130–900 K 范围，最高温度从低于该范围处开始覆盖。界面采用 Cao 的中点约定定义——对于每一列原子，取最低的 type-1 原子与最高的 type-2 原子之间的中点。图1展示了 12 000 个原子系统初始时和晚期的原子分布。

D. 盒计数算法

本文中， D 表示盒计数维数（Minkowski–Bouligand 维数），采用相较于 Cao等人所用算法的三项改进计算得出；完整细节和验证见参考文献 [12]。

边界去除。 令 ℓ 表示盒边长， $N(\ell)$表示与界面相交的边长为 ℓ 的盒子数量。在最大的 ℓ处， $N(\ell)$偏低，因为界面未能填满计算域；在最小的 ℓ处，$N(\ell)$可能在网格或像素尺度上达到饱和。我们通过比较双对数曲线首段、中段和末段的局部斜率来检测这些边界效应，并截去斜率与内部区域显著偏离的端点。这消除了 Cao 数据中早期的 $D \approx 2$ 伪影，该伪影源于界面几乎平坦时未校正的大尺度ℓ污染。

最优标度区域。 边界去除后，我们沿双对数曲线滑动一个至少包含 5 个点的窗口，并选取使 $R^2 \times \Delta\log\,\ell$ 最大的区间来确定最佳标度窗口，同时满足 $R^2 \geq 0.97$ 和 $\Delta\log\,\ell \geq 1.0$ 十倍程的条件。

多偏移平均。 为减少晶格偏差，在盒网格的 8 个（二维）或 8–27 个（三 维）平移偏移位置上计算盒计数，并保留每种盒尺寸对应的最小计数。偏移采用覆盖式放置（$x_{\mathrm{origin}} = x_{\min} - f\ell,\ f = 0,\ 0。25,\ 0。50,\ 0。75$），确保每个网格都覆盖整个界面范围。最大盒尺寸为 $L/8$，其中 L 是计算域

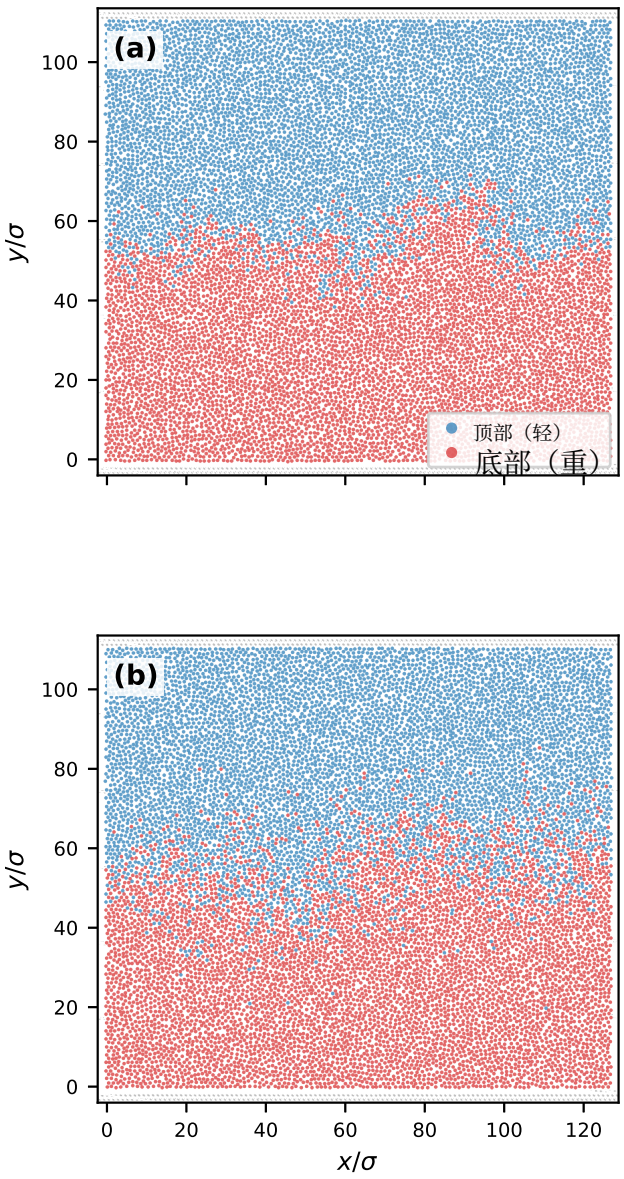

图1。 $T^* = 2.5$时12000原子系统的 LAMMPS 原子位置。红色：下半部分原子（类型1，“重”）；蓝色：上半部分原子（类型2，“轻”）；灰色：冻结壁面原子。（在$A = 0$，两种物质的质量相等；这些标签只是惯用称呼。）（a） $t^* = 0$（约化时间 $t^* = t/\tau_{\mathrm{LJ}}$）：带有热抖动的平坦界面。（b） $t^* = 198$：速度驱动的相互渗透使混合区变宽，但中点云仍保持相同的原子尺度盒计数维数$D \approx 1.36$ （第V C节）。

边长。

标度范围限制。三维盒计数法只有 ∼1个数量级的有效标度范围，受1 m计算域中狭窄混合层（∼5–9 c m）的限制；相比之下，二维测量有 ∼1.5 个数量级。双对数回归仅有5–6个点， R^2 值在0.998附近达到峰值；任何分辨率下的任何时间步都无法达到 $R^2 \geq 0.999$。这一有限的标度范围导致逐快照 $D_{3\mathrm{D}}$ 值出现明显离散 [图4(b)]，，尤其是在混合层较薄的早期时刻。早期时刻的二维测量也存在同样现象 [图4(a)]，此时界面近乎平坦，标度范围同样受到压缩。用于余维检验（表II）的冻结窗口平均值取自界面充分发展的晚期，此时快照间的离散较小（$\sigma_D \leq 0.03$）。

对于二维连续介质模拟，界面是从流体体积法场中提取的$F = 0.5$ 等值线。对于三维模拟，使用 OpenFOAM 的 isoSurface 函数对象，通过单元点插值提取 $F = 0.5$ 等值面，并将其构建为三角剖分网格；随后在三角形集合上进行盒计数。投影维数D_{proj} 通过将三维等值面投影到一个坐标平面上，并对所得轮廓进行二维盒计数来计算。此处列出的数值压缩了 z 轴，得到 xy平面投影像。选择投影方向很重要，因为界面是一个法线为 y的薄片：压缩 z 视图会使其呈侧面，并得到 $D_{\mathrm{proj}} = 1.456$；而压缩 y 视图会使其呈正面，并在相同的最大盒子下得到 1。82。下面不会将这两者中的任何一个与实测对应值进行比较。

III. 界面维数的理论界

在给出数值结果之前，我们先推导线性状态下界面分形维数的精确界。推导是在二维中进行的：界面是单个水平坐标上的图形 $\zeta'(x_1,\ t)$（在本节及全文中，撇号表示相对于平坦基态的扰动，而非导数），因此所得维数 D 位于 $[1, 2]$内。在这一限制条件下，该推导适用于表面张力为零的任何 Rayleigh–Taylor构型；本节末尾将专门讨论 $A = 0$ 速度驱动情形。

A. 界面位移与速度谱

在零表面张力情形下（$\mathcal{T} = 0$），对线性化方程进行正则模态分析 [13]，可得到色散关系$s_n^2 = Agk_n$，其中 $k_n = 2\pi n/L$ 是模态 n的波数。因此，时间增长率为 $s_n \propto \sqrt{n}$，界面位移可以

写为

$$\zeta'(x_1,t)=\sum_{n=1}^{\infty} a_n e^{\sqrt{n}\,t}\cos(2\pi n x_1/L), \tag{2}$$

其中， a_n 是模态 n的初始振幅，且有限计算域修正可忽略不计（对所有$n\ge 1$，$\tanh(n\pi)\approx 1$ ）。对时间求导并在 $t=0$ 处取值，可得初始界面速度

$$w'(x_1,0,0)=\sum_{n=1}^{\infty} b_n\cos(2\pi n x_1/L), \tag{3}$$

其中， $b_n\equiv a_n\sqrt{n}$。界面图的分形维数由这些速度系数的衰减率决定。

B. 上界

假设随机速度系数具有形式 $b_n = X_n/n^{\beta}$，其中 $0\le\beta<1$ ，且 X_n 在 $[-1,1]$上相互独立并均匀分布。X_n 的独立性和对称性使该级数属于 Kahane [14], 所讨论的类别，并满足其正则性条件 $\mathbb{E}(X_n^4)\le C\,\mathbb{E}^2(X_n^2)$；下文两个定理均要求的条件（式（4），第93页）满足 $C=9/5$ ，对每个 n均成立，其中 $\mathbb{E}$ 表示系综期望。指数 β控制谱衰减： $\beta=0$ 对应白噪声 [15]， $\beta=1/2$ 对应 $1/f$ 噪声，而 $\beta\to 1$ 对应布朗运动。于是 $a_n=b_n/\sqrt{n}\propto 1/n^{\beta+1/2}$。定义二进部分方差和

$$c_j=\Bigg(\sum_{2^j\le n<2^{j+1}}\mathbb{E}(a_n^2)\Bigg)^{1/2}=O(2^{-\beta j}), \tag{4}$$

其中，渐近形式可由欧拉求和公式得出。根据 Kahane 的定理3（第89页） [14]，界面轮廓 $\zeta'(x_1)$ 对每个 $\alpha<\beta$ 都属于 Lipschitz类Λ_α 。因此，Falconer 的 Besicovitch–Ursell界（推论11.2(a)，第147页） [7]给出

$$D\le 2-\alpha \quad \text{for all } \alpha<\beta, \quad \text{hence} \quad D\le 2-\beta. \tag{5}$$

C. 下界

ζ'的不规则性给出了相应的下界。取 $b_n\propto 1/n^{\beta}$ ，使得 $a_n\propto 1/n^{\beta+1/2}$，则对每个$\gamma\ge\beta$，条件 $\liminf_{n\to\infty} n^{1+2\gamma}\,\mathbb{E}(a_n^2)>0$ 均成立。Kahane 的定理4（第101页） [14], 针对 $0<\gamma<1$陈述，因此可保证几乎处处有

$$\limsup_{h\to 0}\frac{|\zeta'(x_1+h)-\zeta'(x_1)|}{|h|^{\gamma}}>0 \tag{6}$$

对于每个 x_1 以及每个满足 $\beta\le\gamma<1$的 γ。由于 $\beta<1$ 的取值范围非空，这正是论证所需的全部条件。

用边长为 ℓ 的盒子覆盖图像，并利用 (6)，每个宽度为 ℓ 的竖直列至少需要 $\ell^{\gamma-1}$ 个盒子，因此盒计数总数为 $N(\ell)\ge\ell^{\gamma-2}$。由于这对任意 $\gamma>\beta$ 都成立，

$$D\ge 2-\gamma \quad \text{for all } \gamma>\beta, \quad \text{hence} \quad D\ge 2-\beta. \tag{7}$$

D. 结果

结合（5）和（7）：

$$\boxed{D=2-\beta} \tag{8}$$

几乎处处成立。线性阶段界面的分形维数由初始速度扰动的谱衰减指数精确决定。同一指数也可独立地从图像维数的谱估计中得到。由于 $\mathbb{E}(a_n^2)\propto n^{-(1+2\beta)}$，该剖面的功率谱为 $1/\omega^{p}$，且具有 $p=1+2\beta$；估计式 $\dim_{\mathrm{B}}=\frac{1}{2}(5-p)$（Falconer [7]，第 158 页，式 (11.20)–(11.21)；其中该指数写作 $\bar{\alpha}$）给出 $2-\beta$。这一路径属于启发式方法，而前述两个界限并非如此，因此它只能佐证结果，不能确立结果。

E. 速度驱动问题的应用

方程 (8) 是针对位移图$\zeta'(x_1)$推导的，其系数 $a_n=b_n/\sqrt{n}$ 的衰减速度比速度系数 b_n 快，快出的因子 $\sqrt{n}$源自 RT 增长率。在 $A=0$ ，式 (2) 中的增长因子不存在：界面位移 $\zeta'(x_1,\ t)\approx w'(x_1,\ 0,\ 0)\cdot t$ 直接继承速度系数 b_n，而未经 $\sqrt{n}$正则化。将第 III B–III C 节的推导重复一遍，以 b_n 代替 a_n，二进部分方差和变为

$$c_j=\Bigg(\sum_{2^j\le n<2^{j+1}}\mathbb{E}(b_n^2)\Bigg)^{1/2}=O(2^{(1/2-\beta)\,j}), \tag{9}$$

其仅在 $\beta>1/2$ 时衰减。随后，Kahane上界和下界给出

$$D=\tfrac{5}{2}-\beta \qquad (\tfrac{1}{2}<\beta<\tfrac{3}{2}). \tag{10}$$

从 $2-\beta$ 到 $\frac{5}{2}-\beta$ 的变化，恰好是瑞利–泰勒不稳定性增长率因子 $\sqrt{n}$ 所贡献的半个利普希茨指数。谱估计证实了 (10)：$\mathbb{E}(b_n^2)\propto n^{-2\beta}$ 给出功率谱指数 $p=2\beta$，且 $\dim_{\mathrm{B}}=\frac{1}{2}(5-p)=\frac{5}{2}-\beta$。

对于 $\beta\le 1/2$ ——包括生产模拟中使用的白噪声情形 $\beta=0$——Lipschitz界毫无意义，且 $\sum\mathbb{E}(b_n^2)$ 发散，因此随机级数不存在 L^2 极限，定理也无法作出预测。（同样的收敛失败也影响了 $\beta=0$处的 $A>0$公式，其中 $\sum\mathbb{E}(a_n^2)\sim\sum 1/n$ 以对数速度发散。）在 $\beta=0$ 处，能够成立的说法涉及

数值模拟实际包含的带限部分和：振幅恒定的有限个 N 余弦函数之和是有明确定义的，并且随着 N 增大，其图像会变得越来越充满空间。因此，测得的 D 会随着网格细化而趋近于 2；这是部分和序列的性质，而非某个极限函数的性质。

实际上，带限性将初始条件限制为$N_{\mathrm{modes}} \sim N_x/8$ 至 $N_x/2$ 傅里叶模态。余弦函数的有限和在短于最短波长的尺度上是光滑的，因此测得的 D 低于渐近预测。冻结维数 $D = 1.21$ （第 IV A 节）反映了非线性平流造成的进一步降低；非线性平流会在整个模拟时长内重构界面谱。

F. 采用逐模态振幅初始条件的数值测试

为数值测试 β依赖性，我们在 $\beta = 0.25$、0.50 和 0.75 下，于三个网格上额外运行了九个算例（$300^2, 600^2, 1200^2$；这些网格不同于第 II A 节中的生产组，因为 β测试需要更高的分辨率来区分谱斜率），采用逐模态振幅归一化，使网格细化时每个傅里叶模态中的能量保持不变（相位为随机值，振幅按 $|k|^{-\beta}$确定性衰减）。携带均匀随机相位的确定性模仍然是第 III B 节意义下的独立对称系数，并且满足该节中的正则性条件，其中 $C = 1$，因此推导可不加修改地应用于这些初始条件。由于 β测试算例处于 $A = 0$，相关预测是（10），即 $D = \frac{5}{2} - \beta$，而不是（8）。三个测试值中，只有 $\beta = 0.75$ 位于定理定义域（$\beta > 1/2$）内；在 $\beta = 0.25$ 和 0.50 下，级数不收敛，因此定理不作出预测。两个公式具有相同的 β敏感性： $\partial D/\partial\beta = -1$。

图2(b)展示了每个 β 和网格对应的早期峰值维数 D_{peak}（ $t \le 5$ s内 $D(t)$的最大值），以及理论曲线$D = \frac{5}{2} - \beta$ （适用于 $\beta > 1/2$）和 $D = 2 - \beta$。测得的 D_{peak} 在所有分辨率下都随 β 增大而减小，拟合斜率 $\partial D_{\mathrm{peak}}/\partial\beta$ 分别为 -0.35（300^2）、-0.44（600^2）和 -0.45（1200^2）——约为预测值 -1的44%。

图2(a)追踪瞬时斜率 $\partial D/\partial\beta$ 随时间的变化。 600^2 网格的斜率峰值达到–0.54 ，出现在 $t \approx 2.8$ s时（线性预测的54%）；随后，非线性模态相互作用使所有三个网格都回落至平台，到 $t \approx 4$ s时接近 -0.35 。更精细的 1200^2 网格更快进入非线性阶段——其峰值出现在$t \approx 2.0$ s，而非2.8 s——且仅达到 -0.47。

在定理定义域内唯一的测试点处，绝对 D_{peak} 为 $\beta = 0.75$ 是 1.05–1.08，明显低于两种预测值（ $2 - \beta$为 1.25，$\frac{5}{2} - \beta$为 1.75）。更根本的是， β-测试界面呈现为光滑曲线：在 1200^2 网格上取 $\beta = 0.75$ 时，局部双对数斜率在盒尺寸范围中部升至 $\sim$1.25 ，但在小盒端——盒维数的定义处——又回落至 $\sim$1.0 ；而从 300^2 细化到 1200^2 则扩展了该范围，其中各点最终都达到斜率 ≈ 1 （三个最小盒斜率的平均值：1.118、1.051、1.008）。通过相同流程测量的科赫曲线（$D = 1.262$）围绕其真实维数振荡，并未向 1 漂移。在相同窗口上对光滑正弦曲线（恰为$D = 1$ ）进行盒计数，得到的拟合“维数”因振幅和波长而异，范围为 0.93–1.84（小于 1 的数值是有限线段边缘效应）；上限超过了 $\frac{5}{2} - \beta$ 在 $\beta = 0.75$ 处给出的 1.75 预测值，而所使用的曲线本身并不具有分形性； β-测试值恰好落在这一范围内。 β-测试表明， D 会响应谱指数（这一排序在不同网格上均保持稳健），但这些界面并未发展出能够通过盒计数法分辨的分形结构，因此两个截距都无法进行数值检验。

IV. 结果

A. 网格收敛与早期时间伪影

表 I 总结了冻结分形维数的二维网格收敛性。其中包括 MPLIC 和 Cao等人的原始 SOLA-VOF 代码；SOLA-VOF 算例采用相同的网格级数，并使用 5 点盒式平均滤波器处理初始速度，而不是采用 FFT带通滤波，从而在现代分辨率下复现原始代码的方法。

MPLIC 结果从 150×150处的 1.31 降至 450×450处的 1.21，随后进一步降至 600^2 处的 1.16，最终在两个最细网格上稳定于 1.17–1.13。SVOF 值的规律性较差，这反映了供体-受体重构更强的数值扩散；在 $450 \times$450 时，SVOF 界面截至 $t = 50$ 秒仍未完全冻结，而晚期 $D = 1.29$ 仍呈现缓慢上升趋势。如第 IV D 节所示，这种下降将网格细化与 IC 实现的变化混杂在一起； $D = 1.21$ 值是某一特定速度场对应的冻结维数，而不是普适的网格收敛极限。

Cao等人报告称 $D \approx 2$ 在早期时刻（$t < 5$s），并将其解释为连续介质界面与原子尺度界面之间存在物理差异。如第三节E所示,

表 I. 二维速度驱动混合界面的冻结分形维数 D （$A = 0$、$V_{\max} = 0.05$ m/s），取 $t = 40$–50 s 内的平均值。每种分辨率均采用独立的初始条件实现（第 IV D 节），因此 MPLIC 列将网格细化与初始条件变化混为一谈。

分辨率	Δx （mm）	D （MPLIC）	D （SVOF）
150×150	6.67	1.31 ± 0.01	1.32 ± 0.01
300×300	3.33	1.24 ± 0.03	1.31 ± 0.01
450×450	2.22	1.205 ± 0.006	1.29 ± 0.01
600×600	1.67	1.160 ± 0.010	—
800×800	1.25	1.17 ± 0.01	—
1000×1000	1.00	1.131 ± 0.001	—

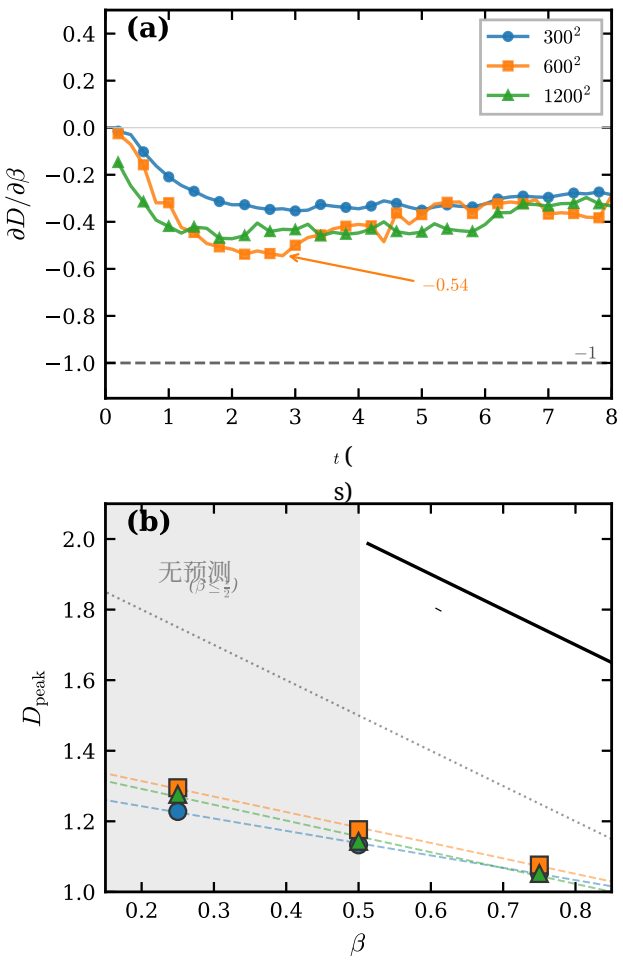

图 2. 在 $A = 0$ 处对 β依赖关系进行的数值测试。(a) 三种采用逐模态振幅初始条件的网格的瞬时斜率 $\partial D/\partial\beta$ 随时间的变化。虚线：预测的 -1 （ $2-\beta$ 和 $\frac{5}{2}-\beta$ 两者均适用）。 600^2 网格在 $t \approx 2.8$ s 时达到 -0.54 ；所有网格到 $\bar{t} \approx 4$ s 时均趋于 -0.35 附近的非线性平台。(b) 早期峰值维数 D_{peak} 随 β 的变化；彩色符号同 (a)。阴影区域：$\beta \le 1/2$，此处级数不收敛，定理不作预测。测得的斜率（预测值的 $\approx 44\%$ -1）和绝对值（ $\beta = 0.75$ 处为 $D_{\mathrm{peak}} \approx 1.05$ ）反映了非线性动力学的快速启动。

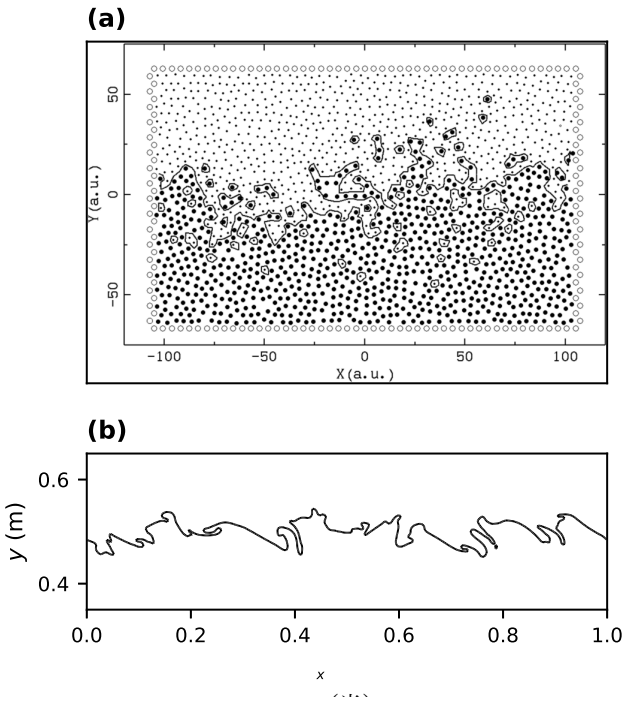

图 3. (a) Cao 的分子动力学模拟 *et al.* [3]（其图 2a；经美国物理学会许可转载）与 (b) 本文的 MPLIC 450×450 连续介质模拟在 $t = 50$ s 时的界面（冻结态）。两种情况下，初始界面均位于 $y_0 = 0.5$ m。尽管物理模型不同，界面复杂度相当：$D = 1.37$ （分子动力学）与 $D = 1.21$ （连续介质）。

白噪声初始条件（$\beta = 0$）不在定理的有效域内 $A = 0$（随机级数不收敛），因此该定理对$\beta = 0$不作预测。Cao的测量受到盒计数边界伪影的主导：早期界面几乎是平坦的——即嵌入二维区域中的一维对象——而最大 ℓ 处的盒计数反映的是矩形计算域边界，而非界面结构。我们的边界移除算法（第二节D）会剔除这种污染。去除偏离的大尺度点后，早期时刻的 D 从接近1.0（平直线）开始，随着速度场使界面起皱而上升，但在已解析的网格上仅达到 $D \approx 1.0$–1。2（300^2 和 450^2）。因此，Cao 报告的 $D \approx 2$ 是由盒计数法造成的边界伪影；去除这一伪影后，Cao 所指出的连续介质与原子尺度早期行为之间的差异便不复存在。

重新提取的分子动力学维数为 $D = 1.373$（第二节 B），高于连续介质的数值。使用 LAMMPS 对系统尺寸为 12 000 至 500 000 个原子的系统进行的独立模拟证实了这一数值，但也表明，它测量的是原子位置的热散布，而非界面起伏；完整的分子动力学分析将在第五节 C 中讨论。两个界面均为单分形；对于连续介质数据，广义维数在测量不确定度范围内满足 $D_0 \approx D_1 \approx D_2$ 。

B. 三维网格收敛

表II展示了三维网格收敛情况。图 4 展示了 $D_{3\mathrm{D}}$ 在三种分辨率下的时间演化，并与二维收敛情况进行对比。

三维维数几乎不受分辨率影响，在三个网格上均为 $D_{3\mathrm{D}} \approx 2.36$ 。在 $150 \times 150 \times 75$（$\Delta x = 6.67$ 毫米）时， $D_{3\mathrm{D}} = 2.371$；在 $300 \times 300 \times 150$ 时，$D_{3\mathrm{D}} = 2.352$；在 $400 \times 400 \times 200$ （ $\Delta x = 2.5$ 毫米）时，$D_{3\mathrm{D}} = 2.361$。Marstrand 预测 $D_{2\mathrm{D}}+1 = 2.205$（使用原始初始条件的 450^2 中的 $D_{2\mathrm{D}} = 1.205$ ）低了 7%

于测得的 D_{3D}；如第 IVD 节所述，这反映了 $A = 0$ 处二维维数对初始条件实现的依赖性。

收敛行为在定性上不同于二维情形。在二维中，界面在所有分辨率下都会在 $t \approx 10$ s 时达到冻结态，而 D 此后不再随时间变化。在三维中，不同网格在不同时间冻结，但冻结后的 D_{3D} 几乎不受分辨率影响。在 $150 \times 150 \times 75$, D_{3D} 会在 $t \approx 10$ s 前稳定至 ∼2.36；在$300 \times 300 \times 150$, 其下降会持续到 $t \approx 20$ s，然后稳定在 2.35 附近；在 $400 \times 400 \times 200$, D_{3D} 会在 $t \approx 14$ s 前达到 2.36 的平台。因此，对每个算例的冻结阶段取平均（表II）需要采用依赖于分辨率的时间窗口。

分辨率相关的冻结时间，其物理原因是速度场的黏性衰减。网格所能解析的最小涡旋尺度为 $\ell \sim 2\Delta x$，其黏性衰减时间为 $\tau_\nu \sim \ell^2/\nu$。在 $150 \times 150 \times 75$, $\tau_\nu \sim$ (13 mm)$^2/10^{-5} \approx 17$ s，因此网格尺度涡旋到 $t = 10$ s 时大多已衰减。在 $400 \times 400 \times 200$, $\tau_\nu \sim$ (5 mm)$^2/10^{-5} \approx 2.5$ s，这些涡旋应在 $t \sim 5\tau_\nu \approx 12$ s 前衰减——这与 D_{3D} 在 $t \approx$ 13–15 s 时趋于平缓相符。

投影维数 D_{proj} 提供了收敛检验。 D_{proj} 从上方收敛，在 $150 \times 150 \times 75$ 时从 1.58 降至 1.51，在 $300 \times 300 \times 150$ 时进一步降至 1.46，并在$400 \times 400 \times 200$时达到该值。网格收敛的三维冻结维数为 $D_{3D} = 2.361 \pm 0.002$ ($400 \times 400 \times 200$, $t = 14$–20 s)。

C. Marstrand 的余维检验

表 III 展示了使用网格收敛值进行的 Marstrand $+1$ 检验。

$+1$ 检验显示存在 7% 的差异： $D_{3D} = 2.361$ 比预测值 $D_{2D} + 1 = 2.205$ 高出 0.156。该差异与分辨率无关——D_{3D} 在各网格上保持平坦（表 II）——反映了 $A = 0$ 处 D_{2D} 对初始条件实现的依赖性（第 IVD 节）：二维和三维模拟使用不同的随机速度场，而冻结的D 取决于具体实现。

投影维数 $D_{proj} = 1.46$ 在 $400 \times 400 \times$200 处从上方收敛（从 $150 \times 150 \times 75$ 处的 1.58 开始）。报告的是轮廓测量结果，而非测试

表II. 速度驱动混合界面三维分形维数的网格收敛。 D_{3D} 和 D_{proj} 是在每个分辨率下，对界面演化的冻结部分取平均所得（见正文）。三维中的标度范围为 ∼1 个数量级（第二节D）。$D_{2D} + 1 = 2.205$ （使用来自 450^2 原始初始条件的 $D_{2D} = 1.205$ ）。

分辨率	网格单元	窗口	D_{3D}	D_{proj}
$150 \times 150 \times 75$	1.69×10^6	$t = 14$–25	2.371 ± 0.011	1.582
$300 \times 300 \times 150$	13.5×10^6	$t = 20$–25 2	$.352 \pm 0.001$	1.505
$400 \times 400 \times 200$	32×10^6	$t = 14$–20	2.361 ± 0.002	1.456

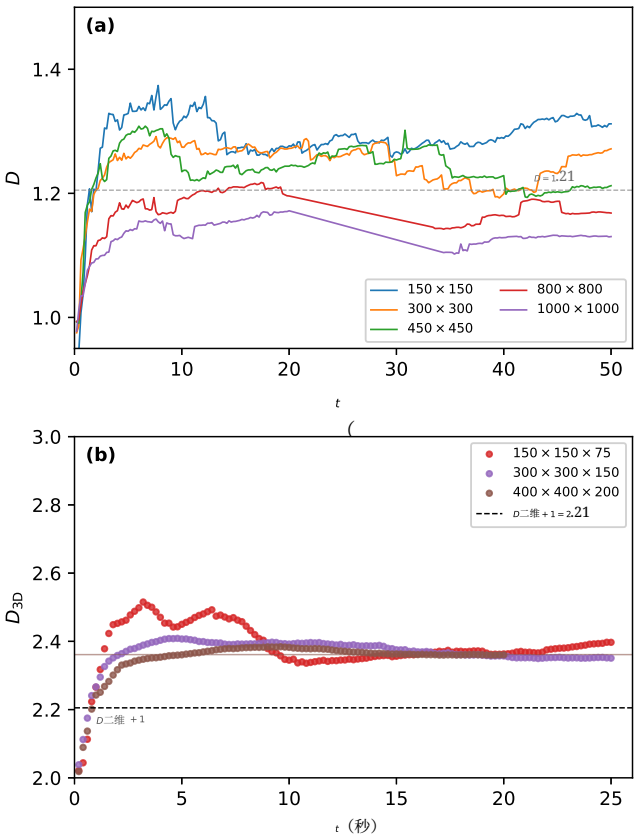

图4。(a) MPLIC 在三个分辨率（150^2–450^2）下的二维分形维数 $D(t)$ 的网格收敛。冻结维数 $D = 1.21$ 在 450×450 时达到，所需时间为 $t \approx 15$ s。(b) 三种三维分辨率下 $D_{3D}(t)$ 的网格收敛。三个网格上的 D_{3D} 均在约 2.36 处冻结，且分辨率越高，冻结时间越长。

余维规则，原因有二。投影并非切片：对于维数高于二的集合，Marstrand 投影定理预测其投影像的维数为完整的二维，因此 $D_{3D} - 1 = 1.361$ 并非对 D_{proj}的预测，两者不应相减 [2]。而 D_{proj} 的计数方式是

表 III。采用网格收敛值对速度驱动的混合界面进行 Marstrand 余维检验。预测值 $D_{2D} + 1$ 假设二维与三维之间存在各向同性自相似性。列出轮廓维数 D_{proj} 仅供参考，不与 $D_{3D} - 1$ 作差：投影并非切片，且其计算采用的最大盒子为 $L/2$ ，而非本文其他部分所用的 $L/8$ （第 IV C 节）。

数量	值
D_{2D} (MPLIC 450_2, $t = 40$–50)	1.205
$D_{2D} + 1$ (Marstrand 预测)	2.205
D_{3D} (MPLIC $400 \times 400 \times 200$, $t = 14$–20)	2.361 ± 0.002
与预测一致	$+7\%$
D_{proj} (轮廓, $400 \times 400 \times 200$)	1.456 ± 0.006



图 5. $400 \times 400 \times$200 次模拟中 $t = 15$ s 时的 $F = 0.5$ 等值面（$1.0 \times 1.0 \times 0.5$ m 计算域，32×10^6 个网格单元）。界面初始时位于 $y_0 = 0.5$ m 处且呈平坦状态，随后被衰减的速度场变形，形成图示的冻结构型。与较粗网格相比，更精细的网格能够分辨更小尺度的褶皱和囊状结构，从而得到 $D_{3\mathrm{D}} = 2.361 \pm 0.002$。

采用 $L/2$的最大盒子，而此处报告的其他维数均采用 $L/8$，因此它们之间的差异有一部分源于方法不同。在同一窗口内重新计数 $L/8$ 的轮廓，得到 1.691 ± 0.012，这使其偏离 $D_{3\mathrm{D}} - 1$ 而非趋近于它，正如投影定理所要求的那样。对于浮力驱动的瑞利–泰勒界面 [1, 2]„，相同的分析流程在网格间距匹配时能以 1% 以内的误差重新得到 $+1$；在这种情况下，吸引子消除了初始条件依赖性。

D. 初始条件敏感性与分形吸引子的缺失

表 I 中的网格收敛混杂了两种效应。带限噪声初始条件（第 IIA 节）是通过在 $N_x \times N_y$ 数组上对白噪声进行滤波生成的；因此，即使使用相同的随机种子，不同分辨率下得到的速度场也各不相同。表面上的收敛$D = 1.31 \to 1.24 \to 1.21$ 可能反映的是真正的网格细化、初始条件实现的变化，或两者兼有。

将级数扩展至 600^2，800^2，和 1000^2，便可消除这种歧义。冻结维数并未进一步收敛，反而在 600^2, 时降至 $D = 1.16$，随后在 800^2 和 1000^2时分别降至 1.17 和 1.13。在 450^2 至 1000^2 之间，$|\Delta D| = 0.08$ 总计下降的幅度与网格细化不一致；每种分辨率都会产生不同的流场和不同的冻结界面。h_{geo} 在 $t = 50$ s 时的总几何混合宽度在整个级数中几乎缩小了五倍，从 150^2 时的 0.32 m 降至 1000^2时的 0.07 m（表 IV），证实每个网格都会生成定性上不同的速度模式。

两项受控实验将初始条件的影响与网格细化的影响区分开来。

插值初始条件。 450×450 速度场采用双线性插值映射至 600^2, 800^2, 和 1000^2 网格，使较精细的网格从相同的大尺度流场开始（平滑处理导致低于源网格尺度的部分出现一定的动能损失

表 IV. 三种初始条件方案下的冻结分形维数 D（对 $t = 40$–50 s 取平均）。原始：每个网格使用独立的带限噪声。插值：将450^2 速度场双线性插值到更细的网格上。固定傅里叶：将相同的傅里叶系数置入每个网格的快速傅里叶变换数组。$h \equiv h_{\mathrm{geo}}$：$t = 50$ s 时的总几何混合宽度，取水平平均体积分数剖面 $\langle F \rangle(y)$ 中 0.01 和 0.99 两个水平之间的宽度。

	原始		插值		固定傅里叶	
Grid	D	h (m)	D	h (m)	D	h (m)
150^2	1.31	0.32	—	—	1.30	0.31
300^2	1.24	0.15	—	—	1.32	0.30
450^2	1.21	0.09	—	—	1.35	0.31
600^2	1.16	0.09	1.21	0.09	1.37	0.31
800^2	1.17	0.07	1.21	0.10	1.38	0.33
1000^2	1.13	0.07	1.21	0.10	1.38	0.33
分子动力学（重新提取）	1.37					

）。冻结维数为 $D = 1.21$(600^2)、1.21 (800^2)和1.21 (1000^2)：该级数收敛至 $D \approx 1.21$。混合宽度 $h_{\mathrm{geo}} \approx 0.09$–0.10 m与源值（0.09 m）相符，证实物理流场得以保留。

固定傅里叶初始条件。 仅生成一组包含 4284 个复数傅里叶系数的系数（随机种子 42，波数范围 $2 \le |\boldsymbol{n}| \le 37$，波长为 27–500 mm，确保最粗 150^2 网格上每个波长有 ≥ 4 个网格单元），并将其置入每个网格的快速傅里叶变换数组中，然后进行逆变换。所有分辨率下的物理速度场完全相同。冻结维数分别为 D =1。30（150^2）、1。32（300^2）、1。35（450^2）、1。37（600^2）、1。38（800^2）和 1。38（1000^2），单调趋近于 $D \approx 1.38$ （表 IV）。混合宽度保持在 0。30 至 0。33 m 之间，证实物理特性与网格无关。

在 1000^2, ，三种初始条件方案得到 $D = 1.13$、1.21 和 1.38——差值达 0.25，远超任何单一方案内的网格收敛不确定性（$\sigma_D \le 0.03$，且除一个网格外的所有网格上均为 ≤ 0.01 ）。混合宽度与 D相对应： $h_{\mathrm{geo}} = 0.07$ 米（原始）、0.10 米（插值）、0.33 米（固定傅里叶）。更宽的混合区会产生更复杂的冻结界面。

只有固定傅里叶实验构成真正的网格收敛性研究；原始初始条件会随着每次加密而改变物理过程。即便如此，收敛后的 $D \approx 1.38$ 仍取决于抽取了哪些傅里叶系数；不同的随机种子会产生不同的流场和不同的冻结维数。

不存在吸引子。这种初始条件依赖性与 $A > 0$处的浮力驱动瑞利–泰勒不稳定性形成对比：在那里，无论初始扰动方法、振幅或随机种子如何，分形维数都会收敛至$D \approx 1.71$ [1]。在瑞利–泰勒情形中，不稳定性机制——由浮力驱动的气泡竞争和并合级联——会持续重塑界面，

从而抹去初始条件的记忆。分形维数是动力系统吸引子的一个不变量。

在 $A = 0$，不存在吸引子。没有浮力时，速度场单调衰减；不存在持续的能量源来重塑界面，使其趋向普适几何形态。冻结界面是生成它的特定速度场留下的化石，不同实现会冻结成复杂程度各异的形态。这一区别至关重要。任何非零的 A，无论多小，都会激活不稳定机制，驱动 D 趋向其吸引子值；而 $A = 0$ 恰好为零时，则属于一种定性上不同的物理状态，此时速度驱动混合会永久保留初始条件印记。

对跨模型比较的启示。表 I 中的“网格收敛”值 $D = 1.21$ 是某一个特定初始条件实现的冻结维数；它并非 $A = 0$ 混合的普适属性。独立的 LAMMPS 模拟表明，分子动力学维数（$D \approx 1.37$）衡量的是原子位置的热散布，而非界面起伏（第 V C 节）。因此，跨模型比较具有类别上的差异——两个 D 值衡量的是不同的物理量——而不同实现间的离散度（$D = 1.13$–1。38）仅是连续介质界面的属性。

对 *Marstrand* 检验的启示。余维检验（第 IV C 节）在二维和三维中采用独立的初始条件实现，而 7% 的差异与 D不同实现间的离散度一致。 $+1$ 规则只要求速度统计特性具有各向同性——初始条件的构造保证了这一性质——并不要求具体的流动模式完全相同。要在 $A = 0$ 进行确切检验，就需要在二维和三维模拟中匹配初始条件实现。

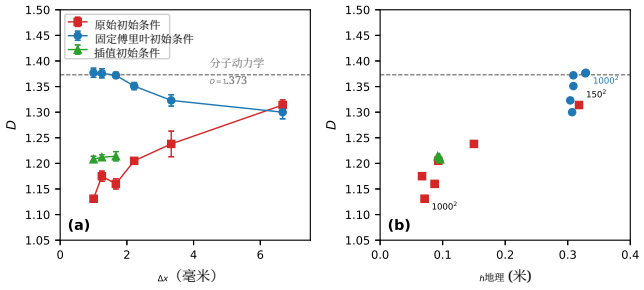

图 6. (a) 三种初始条件方案下，冻结分形维数 D 随网格间距 Δx 的变化：原始带限噪声（圆圈）、插值（方块）和固定傅里叶（三角形）。虚线标示重新提取的 MD 值 $D = 1.37$。原始初始条件级数呈下降趋势，因为每个更精细的网格都会抽取不同的随机实现，从而改变流场，而非对其进行细化。(b) D 随 $t = 50$ s 时总几何混合宽度 h_{geo} 的变化。在全部三种方案中，D 均随 h_{geo}变化：混合区越宽，冻结界面就越复杂。

V. 讨论

A. 余维规则的普适性

表 V 汇总了所有同时具备二维和三维数据的界面生成机制下的 Marstrand $+1$ 检验。

瑞利–泰勒不稳定性和被动标量机制均满足余维规则（在此未匹配的配对下，分别为 2.8–3.2% 和 1%；而对瑞利–泰勒不稳定性，在匹配网格间距下比较两个维数时为 0.6–4.5%），速度搅拌情形则显示出 7% 的偏差。这三种情形涵盖了广泛的分形维数范围（$D_{2\mathrm{D}} = 1.21$至 1.73；Sreenivasan 的被动标量$D_{2\mathrm{D}} = 1.36$ 与 MD 热散射维数恰好相同，这一点将在 V C 节中讨论）。对于速度搅拌情形，这 7% 的偏差反映了 $D_{2\mathrm{D}}$ 在$A = 0$ 时对初始条件实现的依赖性（见 IV D 节）：二维值 $D_{2\mathrm{D}} = 1.21$ 是某一特定随机速度场的冻结维数，而三维值 $D_{3\mathrm{D}} = 2.36$ 则由另一种实现生成。由于不存在吸引子使二者趋向共同的维数，$+1$检验将余维关系与实现间散布混为一谈。

速度搅拌情形提供了一项严格的检验。在三维中，涡旋拉伸会通过正向（Kolmogorov）级联，将动能从大尺度传递至小尺度，并在整个惯性区间内产生细尺度的界面褶皱。在二维中，由于缺少涡旋拉伸，级联方向反转 [9]：能量流向大尺度（逆级联），而涡量平方积分则沿正向级联，其谱更陡 k^{-3}。因此，速度驱动混合的二维模拟与其三维对应系统属于不同的动力系统；原则上，级联不对称性可能导致二维和三维中出现不同的界面几何形态。

速度搅拌情形中 7% 的差异并不

表 V. 不同界面生成机制下的 Marstrand $+1$ 检验。每一行都采用各自维数下最精细的网格，因此这三项比较均未匹配网格，并且彼此可直接比较。在网格间距匹配时，RT数据给出的数值为 0.6–4.5%，而在文献 [2]的四个阿特伍德数下为 1% 或更低。RT数据来自文献 [1]；被动标量数据来自 Sreenivasan [8]；速度搅拌数据来自本研究。 *Sreenivasan 的标量界面是湍流/非湍流外边界（三维流场的横截面切片，而非二维模拟）；文献 [1] 证实，在 $F = 0.1$、0.5 和 0.9 时，D 保持不变，从而排除了这一阈值方面的疑虑。†取决于初始条件的具体实现（第 IV D 节）； $D_{2\mathrm{D}}$ 所示结果对应原始 450^2 初始条件。 ‡RT $D_{3\mathrm{D}}$ 范围的上限来自一次未施加界面扰动便开始运行的模拟，目前正在重新计算 [1]；该行数值待计算完成后会略有变动。

机制	$D_{2\mathrm{D}}$	$D_{3\mathrm{D}}$	$+1$ 偏差
RT不稳定性（$A = 0.0021$）‡	1.68–1.73	2.60–2.62	✓ 2.8–3。2%
被动标量（湍流）*	1.36	2.35	✓ 1%
速度搅拌（$A = 0$）†	1.21	2.36	7%

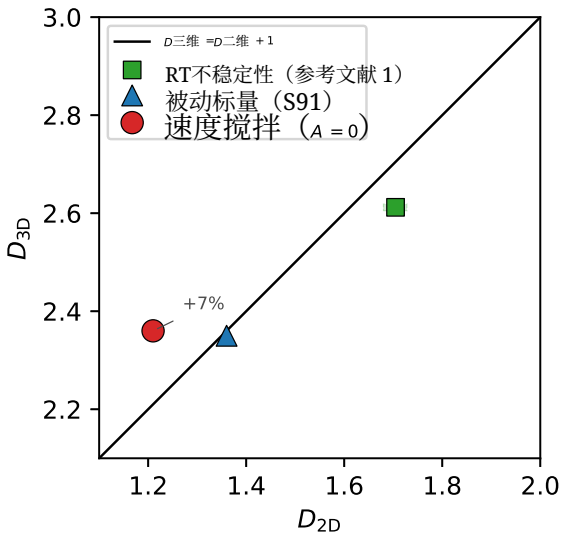

图 7. 跨界面生成机制的 Marstrand $+1$ 检验。对角线为 $D_{3D} = D_{2D} + 1$。RT不稳定性（阴影范围方框，$A = 0.0021$；数据来自参考文献 [1]）、Sreenivasan 的被动标量（三角形）以及速度搅拌界面（圆形，本文工作）。RT不稳定性和被动标量的数据点位于 $+1$ 线上；速度搅拌数据点高于该线 7%，反映了 $A = 0$处的初始条件实现依赖性。

否定余维关系，而是揭示了一个混淆因素：在 $A = 0$，冻结的 D 取决于具体的初始条件实现（第 IVD 节），且二维和三维模拟使用了不同的随机速度场。冻结界面继承了生成它的速度场的各向同性——由于 Marstrand 定理只要求各向同性自相似性，因此，同一实现内应当成立 $+1$ 关系。测得的差异与不同实现间的离散度处于同一量级（$\Delta D \approx 0.32$ 跨初始条件方案），这表明它是初始条件效应，而非各向同性失效。

这一论证解释了表 V 中三种机制的 $+1$ 结果：

- 浮力驱动的不稳定性 (RT)：气泡–并合机制与维数无关，并在所有尺度上产生各向同性的界面几何。在网格不匹配的比较中，$+1$ 偏差为 2.8–6.5%；在网格间距匹配时为 0.6–4.5%，且在后四个较高阿特伍德数下可降至 1% 或更低；随着三维网格不断细化，偏差也随之减小。

- 被动标量 (Sreenivasan)：二维测量是三维标量场的一个真实 Marstrand 切片；$+1$ 符合定理的前提。

- 速度搅拌（本研究）：级联方向在二维和三维中有所不同，且速度场的统计各向同性得以保持，但由于不存在吸引子，$+1$ 检验受到初始条件实现差异（7%）的混杂影响。

B. 粗网格伪影

$+1$ 差异（所有网格上均为 7%）与浮力驱动瑞利–泰勒情形不同，但差异并非比较数值大小所显示的那样。在该情形中，未匹配的偏差为 2.8–6.5%，与此处测得的数值范围重叠；随着三维网格逐渐加密，偏差逐渐减小，从最粗网格上的 5.4–6.5% 降至最细网格上的 3.3–3.7%；而在匹配的网格间距下进行检验后，偏差为 0.6–4.5%，在四个较高阿特伍德数下则降至 1% 或以下 [1, 2]。速度搅拌差异并非如此。它在每个网格上都为 7%，在网格单元数相差十九倍的范围内，D_{3D} 数值始终稳定在 2.371、2.352 和 2.361。这就是两者的区别：区别在于行为，而非大小。速度搅拌情形中，较大的误差由两种效应共同造成：

首先，三维标度范围仅为 ~ 1 个数量级（第二节 D），这会导致 D_{3D} [图4(b)]中的逐快照散布显著。该散布是对称的，不会使冻结窗口平均值产生偏差，但会使测量不确定性高于二维情况。

其次，初始条件实现依赖性（第 IVD 节）：二维和三维模拟使用不同的随机速度场。在 $A > 0$时，吸引子会使二者趋向共同的 D，因此 $+1$ 检验对初始条件差异不敏感。在 $A = 0$时，冻结的 D 保留了初始条件印记，而 $+1$ 检验除了测量任何真实的几何关系外，还测量两个独立实现之间的距离。

分辨率相关的冻结时间是衰减型速度驱动混合所特有的。在浮力驱动瑞利–泰勒流中，不稳定机制持续活跃，界面会达到统计稳态；在网格收敛后，该稳态与分辨率无关。在这种情况下，$+1$误差会随网格细化而减小，并在匹配的网格间距 [1, 2], 下达到 1% 或更低；而在这里，从最粗网格到最细网格，误差都没有变化。

C. 分子动力学维数测量的是什么 ?

虽然 $+1$ 检验探究的是跨维数的几何普适性，但 Cao等人提出的原始问题——分形维数是否取决于物理模型——关注的是同一固定维数内的普适性。为检验这一点，我们使用与 Cao等人相同的 6–12 Lennard–琼斯相互作用，在 LAMMPS 中对系统规模为 12000 至 500 000 个原子的分子动力学混合进行了复现。 [3], 他们称，原子质量取 16 a.u. 是为了加快模拟速度 [3, 第 3841] 页。

在原子尺度（$\ell = 0.8$–2.5σ）对中点云进行盒计数，所有系统尺寸、所有温度以及每个时间步都得到 $D \approx 1.36$ —— 包括 $t = 0$，此时界面按构造为平坦状态（$D = 1.35$）。五种系统尺寸（12k–500k 个原子）下的晚期平均值为 $D = 1.35$–1.37，标准差为 0.003–0.009；维数在最小系统中就已收敛。Cao*et al.* 所指出的温度不敏感性——他们的

图 2(c) 显示，130、300 和 900 K 收敛到相同的晚期 D ——这与我们在较窄的 $T^* = 1.0$–5.0 范围内所得结果一致，因为在这两个范围内，热位移与晶格间距之比仅有适度变化。

在连续介质模拟中， $t = 0$处的平坦界面给出 $D = 1.0$；MD 值与之不同（$D = 1.35$），这表明原子尺度盒计数法并不能测量界面几何。维数实际上由离散原子位置相对于其晶格位点的热散布决定。Cao等人认识到了这一难点，并指出在 $t \approx 0$ 处，中点约定“未能产生完全笔直的直线”，而且早期时刻 [3]的 D “基本上是任意的”。他们认为，在晚期，当界面结构跨越 5–10 个原子间距时， ∼1间距对应的热不确定性便可忽略，且 D 对表面定义不敏感。我们的数据表明，这一论点并不完整。在原子尺度进行盒计数（$\ell = 0.8$–2.5σ）得到 $D \approx 1.36$ ，无论混合状态如何，因此，即使物理界面结构大得多，测量结果仍由热散布主导。50 万原子情形的盒计数曲线清楚显示了尺度分离 [图 8(c)]。在 $\ell = 0.8$–2.5σ处，斜率给出 $D \approx 1.36$ （测量原子点扩散）；而在 $\ell = 3$–50σ处，斜率增大至 $D \approx 1.7$，反映出随着中点云的 y范围随混合宽度增大而逐渐填充。

这两个区间对不断演变的界面反应各不相同。图 8(d) 展示了 500 000 原子案例在两种尺度下测得的 $D(\tau)$。在原子尺度上，从 $\tau = 0$ 到 $\tau = 1000$， D 始终平坦，保持在 ≈1.36 ，这证实它记录的是热散布，而非界面几何。在介观尺度上， D 从 $\tau = 0$ 时的 1.59 上升到后期的 1.71，捕捉到了逐渐增强的起伏，这在 Cao 的图 1(a) 和 3(b) 中清晰可见。但即使在 $\tau = 0$ 时，介观尺度的数值也达到 1.59——此时界面按构造是平坦的，仍远高于平滑直线的$D = 1.0$ 。中点云是一个二维点集，其厚度（即使在 $\tau = 0$ 时，热散布也达到 $\sim 60\sigma$ ；见图 8d ）会污染所有可测尺度上的盒计数斜率。因此，介观尺度的D 混合了两个贡献：热基座（界面在几何上平坦时，即 $\tau = 0$ 的 $D = 1.59$ ）和平流增量（速度场使界面变形所产生的 $\Delta D \approx 0.12$）。相比之下，网格收敛的连续介质维数（ $D = 1.21$）只测量平流贡献，其起点为$D = 1.0$。人们或许会想减去热基线，再将 $1.71 - 0.59 = 1.12$ 与 1.21 进行比较，但这两种贡献在盒计数中彼此纠缠——热散布改变的是点集的有效拓扑 ，而不只是其振幅——因此这种减法并无明确定义。无论哪种区间，测得的都不是连续介质意义上的混合界面分形维数。

通过将中点云简化为一维曲线，可以进行更直接的比较：在 x 中分箱，并计算每个分箱的中位数 y （箱宽 $= 2\sigma$， ≈ 55 每箱原子数），这样既能抑制大部分热散布，又能保留大尺度起伏。对所得线段进行盒计数，得到图 9 所示的轨迹：分子动力学和连续介质曲线均从接近 $D \approx 1.2$处开始，并收敛至 $D \approx 1.43$。残余的 $\tau = 0$基线为 1.26（理想值为 1.0），反映了经过中值滤波器后仍然存在的热散布；分子动力学的晚期数值在连续介质结果的 ± 0.05 范围内振荡，这与分箱噪声底限一致。

在原子尺度上，跨模型比较是定性的，而非定量的：连续介质值 D =1.21 描述的是界面起伏，而分子动力学值$D = 1.36$ 描述的是围绕晶格位置振动的原子的空间分布。这些是不同的物理量。不过，将中点云通过中位数分箱归约为一维曲线（图 9）后，分子动力学轨迹收敛至 $D \approx 1.43$, 与连续介质的晚期值相同。剩余差异——基线为 1.26，而非 1.0——是分箱噪声底限。因此，归约为曲线的分析恢复了原始原子尺度盒计数所掩盖的普适性：两种物理模型产生相同的界面几何，但要从分子动力学中测量界面几何，必须先滤除热散布。

马斯特兰德 $+1$ 检验（第 IV C 节）比较的是二维和三维中的同一物理量——连续介质盒计数 D 。速度驱动界面（$D_0 \approx D_1 \approx D_2$）的单分形特征是一种连续介质属性，已在全部三种初始条件方案中得到验证（第 IV D 节）。原子尺度分子动力学分析表明，在 $\ell < 3\sigma$ 处进行原始盒计数测量的是热噪声，而非几何形态；只有在去除热贡献后，才能跨物理模型比较界面维数。

VI. 结论

我们借助三十年来的方法改进，重新审视了 Cao等人 [3] 的分形分析。

1.重新分析与初始条件敏感性。在最高达 1000×1000 的网格上进行现代几何VOF重构后发现，在 $A = 0$处的冻结连续介质维数取决于速度初始条件实现；在三种受控初始条件方案下，收敛值分别为 $D = 1.13$、1.21和1.38。初始条件依赖性源于此处不存在分形吸引子——没有浮力时，冻结界面会永久保留初始速度场的印记；与之相反，在 $A > 0$ 瑞利–泰勒不稳定性中，无论初始条件族如何，最精细网格上的 D 都接近1.71 [1]。独立的LAMMPS分子动力学模拟（ 12k–500k个原子）表明，分子动力学维数$D \approx 1.36$ 衡量的是原子位置相对于晶格位点的热散布，而非界面几何——在 $t = 0$ 处，平坦界面与完全混合区域得到相同的 D 。这一结果具有尺度依赖性：

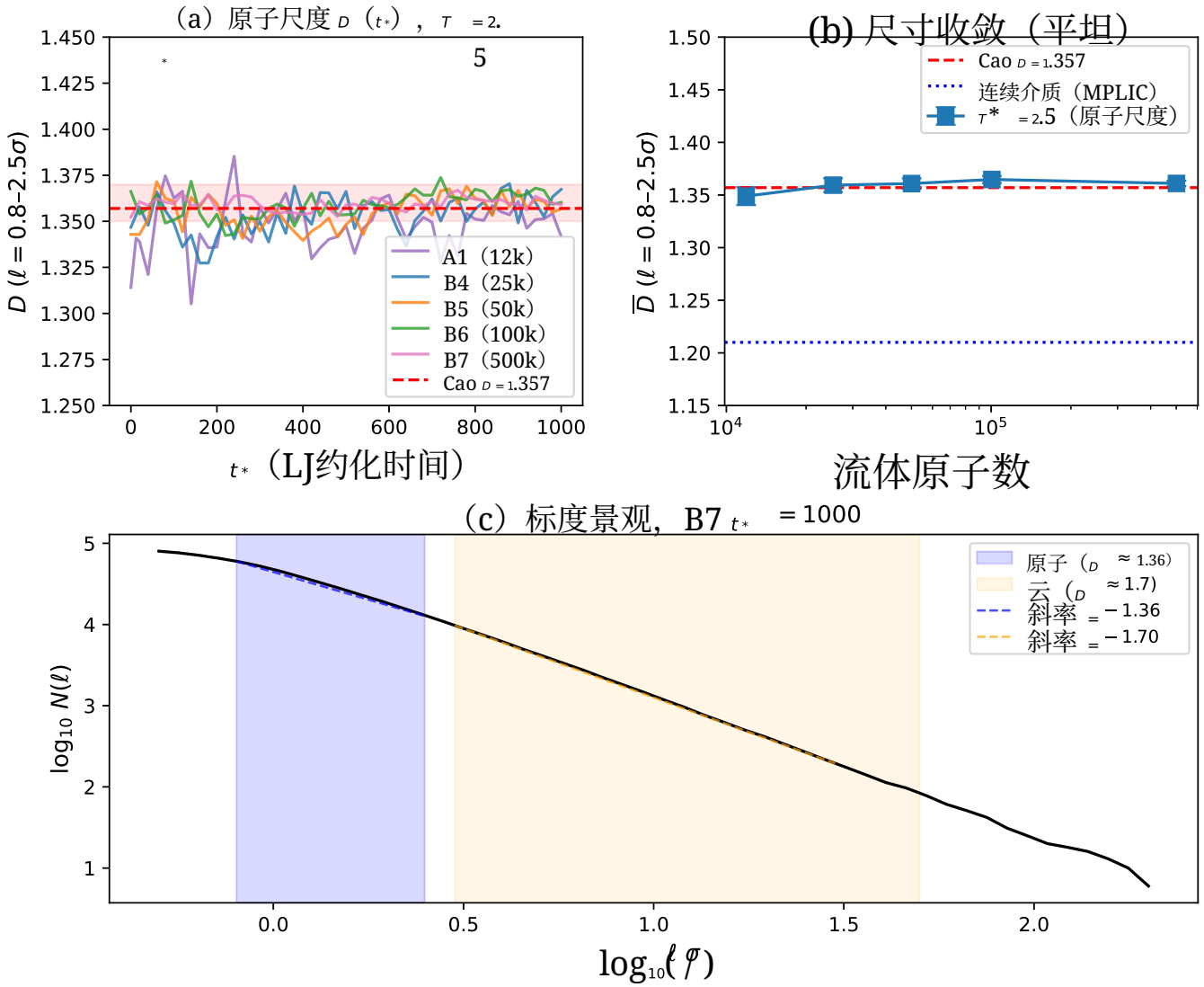

图 8. LAMMPS 分子动力学结果（500k 原子情形，$T^* = 2.5$）。(a) 五种系统尺寸（12k–500k 个原子）下的原子尺度盒计数维数 $D(\tau)$。$D \approx 1.36$ 在所有时刻均成立，包括界面平坦时的 $\tau = 0$；红色虚线标出 Cao 已发表的数值 $D = 1.357$。(b) 晚期 $\bar{D}$ 随流体原子数的变化，证实即使从最小系统开始也能收敛。蓝色点线标出连续介质 MPLIC 数值 $D = 1.21$。(c) $\tau = 1000$时的盒计数双对数曲线。可见两个区间：在 $\ell = 0.8–2.5\sigma$（蓝色阴影）范围内，斜率给出 $D \approx 1.36$，衡量原子位置的热散布；在 $\ell = 3–50\sigma$（橙色阴影）范围内，斜率增大至 $D \approx 1.7$，反映中点云的填充。(d) $D(\tau)$的尺度依赖性。从 $\tau = 0$起，原子尺度维数（蓝色）平稳保持在 1。36；介观尺度维数（橙色）则从 1。59 上升至 1。71，体现界面起伏的增加，但其起点远高于 $D = 1.0$（灰色点线），这是因为即使界面平坦，中点云仍受到热污染。

在介观尺度（$\ell = 3–50\sigma$）上，D 确实会随时间增长（从1.59增至1.71），反映出界面起伏不断加剧；但即便如此，平坦界面得到的也是$D = 1.59$，而非 1.0，因为中点云的热厚度会干扰所有可达到尺度上的盒计数。在原子尺度上，跨模型“差异”是本质性的——所比较的两个量在物理上并不相同。不过，将中点云简化为一维曲线（在 2σ处按 x分箱，取每箱 y 的中位数），再对所得线段进行盒计数，可恢复 $D \approx 1.43$，与之相符

连续介质：一旦滤除热散布，不同物理模型中的界面几何便具有普适性。

2.理论界。线性阶段界面的分形维数在 $A > 0$处恰为 $D = 2-\beta$，在 $A = 0$处恰为 $D = \frac{5}{2} - \beta$；其中 β 是初始速度扰动的谱衰减指数，而半个单位的偏移则来自 RT 增长率因子 $\sqrt{n}$贡献的利普希茨指数。对于 Cao ($\beta = 0$) 使用的白噪声初始条件，级数不收敛，定理无法给出预测。

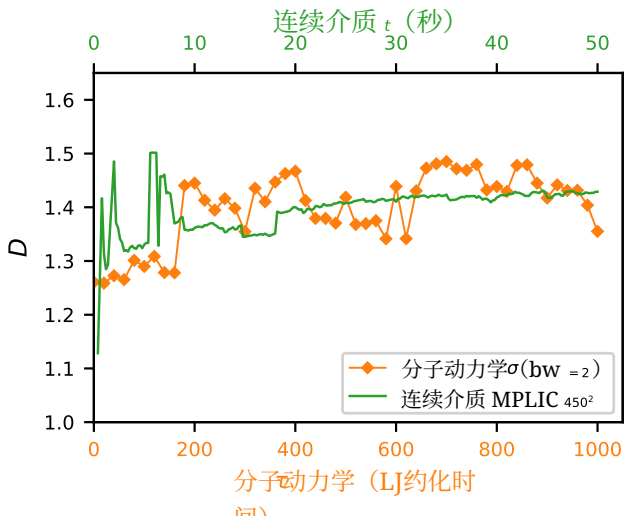

图 9. 分子动力学模拟（橙色）和连续介质 MPLIC 450^2 模拟（绿色）所得的分形维数轨迹，分别绘制在独立的时间轴上（底部：LJ约化时间；顶部：秒）。分子动力学曲线通过将中点云约化为一维曲线（每个 x-分箱取 y 中位数，分箱宽度为 $= 2\sigma$，每箱 ≈ 55 个原子），再对所得线段进行盒计数法得到。两条轨迹均从接近 $D \approx 1.2$ 处开始，并收敛至 $D \approx 1.43$。分子动力学曲线的 $\tau = 0$ 基线为 1.26（理想值为 1.0），这反映了中位数分箱后残留的热散布；分子动力学晚期数值在连续介质结果的 ± 0.05 范围内振荡。

Cao等人 报告的早期 $D \approx 2$ 是盒计数边界伪影；将其移除后，表面上的连续介质与原子尺度的区别便不复存在。

3.三维网格收敛。 三维速度驱动混合界面在最精细网格（$400 \times 400 \times 200$）上的维数为 $D_{3\mathrm{D}} = 2.361 \pm 0.002$，在全部三个网格（$D_{3\mathrm{D}} \approx 2.36$）上的结果几乎不受分辨率影响。Marstrand $+1$ 检验显示存在 7% 的偏差，这反映了 $A = 0$ 处的 $D_{2\mathrm{D}}$ 依赖于初始条件的具体实现，而非各向同性失效。

4.余维规则。 结合文献 [1, 2], 的瑞利–泰勒不稳定性数据，其中无法匹配的 $+1$ 偏差为2.8–6.5%，且随网格细化而减小；再结合被动标量混合（1%）的结果，速度搅拌情形显示出7%的差异，该差异不随分辨率变化，且与 $A = 0$下 D 的不同实现间离散程度一致。要在这一条件下对 $+1$ 进行定论性检验，必须使二维和三维模拟采用匹配的初始条件实现。

致谢

本研究未获得任何资助机构、商业部门或非营利部门的专项资助。Claude Opus 4.6（Anthropic，2026年）用于文献核验、协助起草和文字评议；所有数值模拟、分析代码、数值结果、图和科学结论均为作者的原创成果。作者声明不存在任何利益冲突。

作者贡献。 R.W.D.构思并设计了本研究，完成了所有连续介质和分子动力学模拟，开发了分析代码，制作了所有图，并撰写了手稿。S.R.D.推导了界面维数的理论界（第III节），并审阅了手稿。

数据可用性。 如有合理需求，可向通讯作者索取模拟数据和分析脚本。

[1] R. W. Douglass, 《不可混溶、低 Atwood 数瑞利–泰勒不稳定性的分形几何》, 流体力学杂志（2026年）, 已投稿。[2] R. W. Douglass, 《瑞利–泰勒不稳定性中跨 Atwood 数的分形普适性》, 流体力学杂志（2026年）, 准备中。[3] H. Z. Cao、J. R. Hardy、R. W. Douglass、P. T. Dawkins 和 S. R. Dunbar, 《连续介质和原子尺度下二维流体混合的分形特征》, 《物理评论A》**45**, 3841（1992）。[4] C. W. Hirt 和 B. D. Nichols, 《用于自由边界动力学的流体体积法（VOF）》, 《计算物理学杂志》**39**, 201（1981）。[5] J. M. Marstrand, 《分数维平面集的一些基本几何性质》, Proc. Lond. Math. Soc. **s3-4**, 257（1954）。[6] P. Mattila, *Geometry of Sets and Measures in Euclidean Spaces* 1995 （剑桥大学出版社, ）。[7] K. Falconer, *Fractal Geometry: Mathematical Foundations and Applications*, 第1版（Wiley, 奇切斯特, 1990）ISBN 0-471-92287-0。[8] K. R. Sreenivasan, 流体湍流中的分形与多重分形, 《流体力学年度评论》**23**, 539（1991）。[9] R. H. Kraichnan, 二维湍流中的惯性区间, 《流体物理学》**10**, 1417（1967）。[10] A. P. Thompson、H. M. Aktulga、R. Berger、D. S. Bolintineanu、W. M. Brown、P. S. Crozier、P. J. in 't Veld、A. Kohlmeyer、S. G. Moore、T. D. Nguyen、R. Shan、M. J. Stevens、J. Tranchida、C. Trott 和 S. J. Plimpton, LAMMPS——一种适用于原子、介观和连续介质尺度的基于粒子的材料建模灵活模拟工具, 《计算物理通讯》**271**, 108171（2022）。[11] D. L. Youngs, 大幅流体变形下的时变多材料流动, 载于 *Numerical Methods for Fluid Dynamics*, K. W. Morton 和 M. J. Baines 编（Academic Press, 纽约, 1982）, 第273–285页。[12] R. W. Douglass, 自动化盒计数分形维数分析：滑动窗口优化与多重

分形验证，Fractal Fract. **9**，633（2025）。[13] R. Bellman 和 R. H. Pennington，表面张力和黏度对泰勒不稳定性的影响，Q. Appl. Math. **12**，151（1954）。

[14] J.-P. Kahane，*Some Random Series of Functions*，第2版，剑桥高级数学研究丛书，第5卷（剑桥大学出版社，1985年）。[15] M. J. Buckingham，*Noise in Electronic Devices and Systems*（Ellis Horwood，奇切斯特，1983）。