

3.2 关键核心技术突破情况（候选人在关键核心技术突破中取得的主要贡献，破解的关键难题和技术瓶颈，及其价值和意义。以近五年为主，不超过二页。）

在界面追踪领域，申请人的关键核心技术突破有以下几点：

- I. 现有 Volume-of-fluids (VOF) 方法和 Front Tracking (FT) 方法缺乏严格系统的理论基础；而申请人建立了一个界面追踪及其数值方法的理论分析框架^[21,22,24,26,27]，填补了这一空白。
- II. 对于等距变换的流场来说，现有 VOF 方法和 Level set (LS) 方法难以保持流相的几何特征；而申请人提出的方法很好的保持了流相的几何特征；见图 1。对于同胚映射的流场来说，现有VOF 和 LS 方法难以保持流相的拓扑特性；而申请人提出的方法很好的保持了流相的拓扑特性；见图 2。
- III. 用现有方法难以计算流相的整体拓扑示性数；而申请人提出的方法能以最优复杂度 $O(1)$ 计算这些拓扑示性数；见图 3。
- IV. 申请人提出的四阶及以上精度的界面追踪方法和曲率估计算法把现有方法的精度提高了多个数量级；见“第三方肯定性评价”证明材料中的图 4。

申请人“以几何和拓扑的手段解决几何和拓扑的问题”的核心理念在界面追踪领域中具有独辟蹊径的开创性，围绕这个核心理念提出的理论框架为多相流的数值模拟奠定了坚实的数学基础；申请人和同事还进一步研发了高精度、高效率、保结构的数值算法，大大提高了现有方法的计算精度、计算效率、算法灵活性以及对物理结构的保真性。这些数学理论和高保真算法为多相流的未来发展提供了强有力的研究工具。

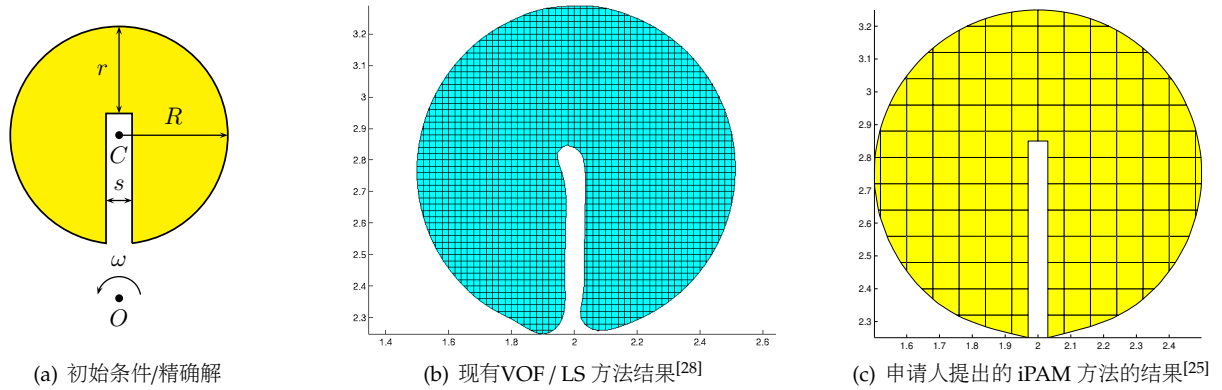


图 1: 将子图 (a) 中圆盘旋转两周，界面追踪最终结果应与初始条件完全重合。但是 VOF 方法和 LS 方法即使在很密的网格上也无法保持尖点（界面的导数不连续点）附近的几何特性，将其平滑化；而申请人和同事提出的新方法很好的保持了圆盘的这个特征。子图 (b,c) 展示了实际网格上的计算结果。

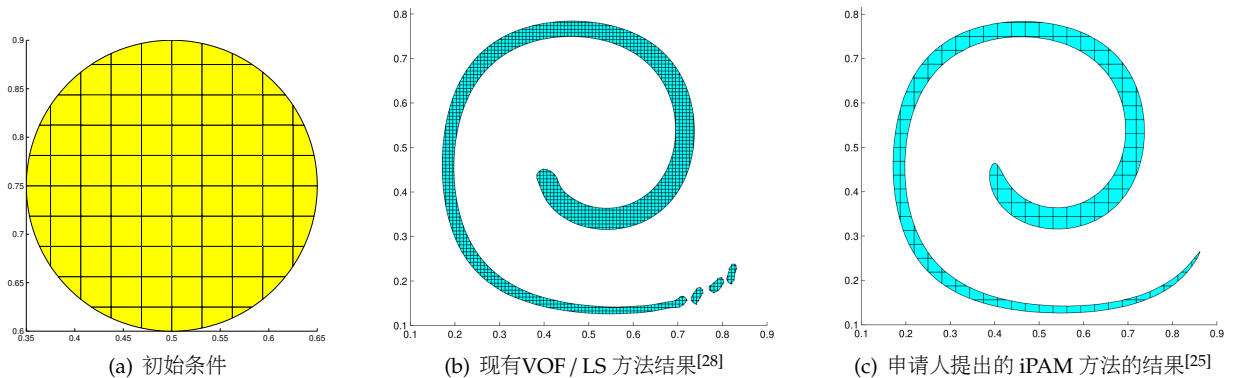


图 2: 一个涡旋流场将子图 (a) 中圆盘状流相剪切为细长螺旋形；由于流场对应的流函数是一个同胚映射，流相在变形过程中始终应与 (a) 中的圆盘同胚。VOF 方法和 LS 方法即使在很密的网格上也无法保持这个拓扑特性；而申请人和同事提出的 iPAM 方法很好的保持了圆盘的拓扑性质。子图 (b,c) 展示了实际网格上的计算结果。

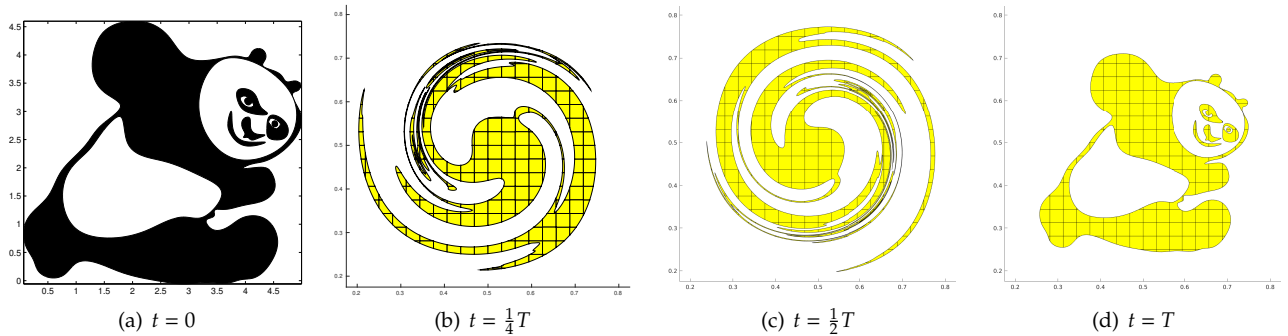


图 3: 在涡旋流场的标准测试下申请人的方法对具有复杂拓扑结构的流相进行追踪的结果[27, Figure 14]; 最后时刻 $t = T$ 的精确解应与初始值完全重合。在这个同胚映射的流场下, 现有的 FT、LS、和 VOF 方法均无法保持流相的拓扑特性, 也难以计算流相的贝蒂数。相比之下, 申请人的方法保持了流相的所有拓扑特性, 并且能以最优复杂度 $O(1)$ 返回这些拓扑示性数。注: 一个拓扑空间的第 n 个贝蒂数 (Betti number) 是它 n 维空洞的个数, 记为 B_n ; 特别的, B_0 是其连通分量的个数。子图 (a) 中熊猫的拓扑示性数为: $B_0 = 6$; 右眼 ($x < 4.4$): $B_1 = 1$; 身体: $B_1 = 2$; 其余所有连通分量: $B_1 = 0$ 。

在不可压流体的数值模拟方面, 申请人的关键核心技术突破是对无滑移条件的 **Incompressible Navier-Stokes (INS)** 方程提出了一个时空一致四阶精度的投影方法。与美国科学院院士 John Bell 和 Phillip Colella 等人提出的经典二阶投影方法 MCG [3,15] 比较, 即使对一个雷诺数为 20,000 的湍流边界层问题只要求涡量精度达到两位有效数字, 申请人的四阶方法也能把现有二阶 MCG 投影方法的计算效率提高上万倍! 具体试验结果和讨论见 [23]。

由于不可压限制条件及无滑移边界带来的困难, 绝大多数现有 INS 方程的数值方法精度仅为二阶。例如, 鞍点法 [10] 对 INS 方程同时进行时间离散和空间离散得到一个具有鞍点结构的线性方程组, 因此待解方程组的形式取决于时间积分的细节。当时间积分方法改变后, 需要重新推导这个线性方程组的具体形式, 这对于一些高阶时间积分方法来说是不现实的, 因为对应方程组的复杂度往往是不可接受的。

美国科学院院士、UC Berkeley 的 A. Chorin 教授提出的投影方法 [5] 是求解 INS 方程最流行的数值方法之一。半个多世纪以来有非常多的学者试图将该方法拓展到高阶精度, 但是诸多努力都止步于二阶。事实上, 即使为了保证二阶精度, 也必须从时间积分方法的细节推导出辅助中间变量 \mathbf{u}^* 的边界条件, 否则将导致不同程度的降阶 [4]。对于四阶及以上精度的时间积分方法来说, 推导与其一致的 \mathbf{u}^* 的边界条件是非常困难的。因此在设计时空一致高阶方法时, 有必要要求

(Goal.1) 时间积分和空间离散完全解耦, 不存在非物理的中间变量;

(Goal.2) 以“黑匣子”的方式处理时间积分模块, 从而做到对其更换时无需进行任何重新推导。

Pressure Poisson equation (PPE) 方法 [9,19] 用压强的泊松方程取代不可压条件, 满足了这两个要求, 但是该方法的突出缺点是对流速的散度没有任何控制, 在高阶离散时计算结果很容易发散。2007年美国 Duke University 的 Jian-guo Liu 教授等人在《Comm. Pure Appl. Math.》上提出了一个 INS 方程的 unconstrained PPE (UPPE) 陈述 [14], 其突出优点是流速散度满足一个扩散方程, 这增强了数值稳定性。但是在 UPPE 的控制方程中没有任何投影算子, 因此由 Method of lines 离散得到常微分方程组后, 任何投影步骤都违背了其控制方程。另外, 对有限体积法来说, 投影算子的离散误差对整个离散系统稳定性的影响不明确。数值试验结果显示, 基于 UPPE 陈述的四阶精度有限体积方法确实是不稳定的。综上所述, 为无滑移边界的 INS 方程设计时空一致四阶精度的数值方法是计算流体力学的一个核心难点; 原因之一是在保证稳定性的前提下, 与其说 (Goal.1) 和 (Goal.2) 是对时空一致四阶方法的更高要求的话, 不如说是对它们的基本要求。

高雷诺数不可压流体的物理过程往往依赖于流速的一阶和二阶导数, 因此现有的二阶方法的结果和实际物理过程之间有很大偏差。申请人提出的投影方法不仅满足了 (Goal.1) 和 (Goal.2), 而且达到了时空一致四阶精度。这为高雷诺数流体的研究提供了强有力的研究工具, 对湍流物理过程的精细研究具有重要的科学意义。

参考文献见第三方肯定性评价证明材料。

申请人在“关键核心技术突破情况”中总结的成果得到了全球许多知名学者的肯定。以下三个评价举例分别来自“学术贡献一、二、三”第三方肯定性评价证明材料中的评价举例1；在这里重新组织的目的是为了重点强调这些突破性成果获得的国际同行的认可。

评价举例 1. 美国 Princeton University 教授 J. Spangenberg 和丹麦技术大学 (Technical University of Denmark) 教授 J. H. Hattel 在《J. Comput. Phys.》上评价申请人用微分几何和布尔代数 为 VOF 对流步算法提供了严格的数学分析 [6, p. 586]: “Zhang has presented a rigorous mathematical analysis of VOF-advection through the prism of differential geometry and Boolean algebra.”

评价举例 2. 西班牙马德里理工大学 (Universidad Politécnica de Madrid) 教授 J. Carpio 在《J. Comput. Phys.》上评价申请人的 iPAM 方法是卓越的 [17, p. 103]: “... the remarkable iPAM method by Zhang and Fogelson, ...”; 更多评价见图 4。

评价举例 3. 谱方法国际知名学者、美国 Florida State University 教授 M. Y. Hussaini 以及多相流国际知名学者、美国 Florida State University 教授 M. Sussman 2019 年在《J. Sci. Comput.》上肯定了申请人提出的 广义投影方法的四阶精度 [16, page 1529]: “Zhang developed a fourth order projection method for computing solutions to the constant density and constant viscosity Navier-Stokes equations with no-slip boundary conditions at the computational domain walls.”

参考文献

- [1] H. T. Ahn and M. Shashkov. Adaptive moment-of-fluid method. *J. Comput. Phys.*, 228(8):2792–2821, 2009.
- [2] E. Aulisa, S. Manservigi, and R. Scardovelli. A surface marker algorithm coupled to an area-preserving marker redistribution method for three-dimensional interface tracking. *J. Comput. Phys.*, 197:555–584, 2004.
- [3] J. B. Bell, P. Colella, and H. M. Glaz. A second-order projection method for the incompressible Navier-Stokes equations. *J. Comput. Phys.*, 85:257–283, 1989.
- [4] D. L. Brown, R. Cortez, and M. L. Minion. Accurate projection methods for the incompressible Navier-Stokes equations. *J. Comput. Phys.*, 168(2):464–499, 2001.
- [5] A. J. Chorin. Numerical solution of the Navier-Stokes equations. *Math. Comput.*, 22(104):745–762, 1968.
- [6] R. Comminal, J. Spangenberg, and J. H. Hattel. Cellwise conservative unsplit advection for the volume of fluid method. *J. Comput. Phys.*, 283:582–608, 2015.
- [7] D. Enright, R. Fedkiw, J. Ferziger, and I. Mitchell. A hybrid particle level set method for improved interface capturing. *J. Comput. Phys.*, 183:83–116, 2002.
- [8] D. Enright, F. Losasso, and R. Fedkiw. A fast and accurate semi-lagrangian particle level set method. *Comput. Struct.*, 83(6-7):479–490, 2005.
- [9] P. M. Gresho and R. L. Sani. On pressure boundary conditions for the incompressible Navier-Stokes equations. *Int. J. Numer. Methods Fluids*, 7:1115–1145, 1987.
- [10] B. E. Griffith. An accurate and efficient method for the incompressible Navier-Stokes equations using the projection method as a preconditioner. *J. Comput. Phys.*, 228(20):7565–7595, 2009.
- [11] P. Gómez, J. Hernández, and J. López. On the reinitialization procedure in a narrow-band locally refined level set method for interfacial flows. *Int. J. Numer. Methods Eng.*, 63(10):1478–1512, 2005.
- [12] D. J. E. Harvie and D. F. Fletcher. A new volume of fluid advection algorithm: The stream scheme. *J. Comput. Phys.*, 162:1–32, 2000.
- [13] C. B. Ivey and P. Moin. Conservative and bounded volume-of-fluid advection on unstructured grids. *J. Comput. Phys.*, 350:387–419, 2017.
- [14] J.-G. Liu, J. Liu, and R. L. Pego. Stability and convergence of efficient Navier-Stokes solvers via a commutator estimate. *Comm. Pure Appl. Math.*, 60:1443–14, 2007.
- [15] D. F. Martin, P. Colella, and D. Graves. A cell-centered adaptive projection method for the incompressible Navier-Stokes equations in three dimensions. *J. Comput. Phys.*, 227:1863–86, 2008.
- [16] C. Pei, M. Vahab, M. Sussman, and M. Y. Hussaini. A hierarchical space-time spectral element and moment-of-fluid method for improved capturing of vortical structures in incompressible multi-phase/multi-material flows. *J. Sci. Comput.*, 81:1527–1566, 2019.
- [17] J. L. Prieto and J. Carpio. A-SLEIPNNIR: A multiscale, anisotropic adaptive, particle level set framework for moving interfaces. transport equation applications. *J. Comput. Phys.*, 377:89–116, 2019.
- [18] W. J. Rider and D. B. Kothe. Reconstructing volume tracking. *J. Comput. Phys.*, 141:112–152, 1998.
- [19] D. Shirokoff and R. R. Rosales. An efficient method for the incompressible Navier-Stokes equations on irregular domains with no-slip boundary conditions, high order up to the boundary. *J. Comput. Phys.*, 230(23):8619–8646, 2011.
- [20] X. Yang, A. J. James, J. Lowengrub, X. Zheng, and V. Cristini. An adaptive coupled level-set/volume-of-fluid interface capturing method for unstructured triangular grids. *J. Comput. Phys.*, 217(2):364–394, 2006.
- [21] Q. Zhang. On a family of unsplit advection algorithms for volume-of-fluid methods. *SIAM J. Numer. Anal.*, 51(5):2822–2850, 2013.
- [22] Q. Zhang. On donating regions: Lagrangian flux through a fixed curve. *SIAM Review*, 55(3):443–461, 2013.
- [23] Q. Zhang. GePUP: Generic projection and unconstrained PPE for fourth-order solutions of the incompressible Navier-Stokes equations with no-slip boundary conditions. *J. Sci. Comput.*, 67:1134–1180, 2016.
- [24] Q. Zhang and L. Ding. Lagrangian flux calculation through a fixed planar curve for scalar conservation laws. *SIAM J. Sci. Comput.*, 41:A3596–A3623, 2019.
- [25] Q. Zhang and A. Fogelson. Fourth-order interface tracking in two dimensions via an improved polygonal area mapping method. *SIAM J. Comput.*, 36:A2369–A2400, 2014.
- [26] Q. Zhang and A. Fogelson. MARS: An analytic framework of interface tracking via mapping and adjusting regular semi-algebraic sets. *SIAM J. Numer. Anal.*, 54:530–560, 2016.
- [27] Q. Zhang and Z. Li. Boolean algebra of two-dimensional continua with arbitrarily complex topology. *Math. Comput.*, 89:2333–2364, 2020.
- [28] Q. Zhang and P. L.-F. Liu. A new interface tracking method: The polygonal area mapping method. *J. Comput. Phys.*, 227:4063–88, 2008.

Table 3

Comparison of A-SLEIPNNIR with published results: circular droplet in periodic ($T_p = 8$), single vortex flow. NE and NC are the number of elements and nodes, respectively, at time $t = 4$ (maximum deformation). All data extracted from the cited references.

Method [Ref.]	h_{\min}^{-1}	h_{\max}^{-1}	C	N_p	NE	NC	e_{L1}	$\Delta A/A_0(\%)$
Rider–Kothe (Puckett) [72]	32	32	1.000		1024	1024	4.78×10^{-2}	N/A
CCU [27]	32	32	1.000	N/A	1024	1024	3.81×10^{-2}	Machine
Stream (Puckett) [74]	32	32	1.000		1024	1024	3.72×10^{-2}	N/A
ACLSVOF-A [71]	≈ 32	10	N/A		523	523	3.54×10^{-2}	7.57×10^{-3}
Mark-C-VOF [75]	32	32	1.000	1397	1024	1024	2.52×10^{-3}	4.85×10^{-1}
AMR-MOF [32]	32	32	1.000		1024	1024	2.33×10^{-2}	1.53×10^{-11}
A-SLEIPNNIR	32	2	0.320	50000	658	1329	1.27×10^{-4}	7.99×10^{-6}
iPAM linear h^2 [28]	32	32	1.000	N/A	1024	1024	4.32×10^{-6}	Machine
iPAM cubic $5h^2$ [29]	32	32	1.000	N/A	1024	1024	5.89×10^{-7}	Machine
EMFPA- V^{cor} [67]	≈ 64	≈ 64	0.500		3974	2072	4.50×10^{-2}	Machine
Rider–Kothe (Puckett) [72]	64	64	1.000		4096	4096	6.96×10^{-3}	N/A
CCU [27]	64	64	1.000	N/A	4096	4096	4.58×10^{-3}	Machine
NBLR-LS WENO [31]	64	64	1.000		>4096	>4096	3.80×10^{-3}	4.10×10^0
ACLSVOF-A [71]	≈ 64	10	N/A		1107	1107	3.56×10^{-3}	1.41×10^{-3}
SLPLS [24]	64	64	4.900	≈ 20000	4096	4096	3.34×10^{-3}	1.83×10^0
AMR-MOF [32]	64	32	2.000		>1237	>1237	3.15×10^{-3}	1.89×10^{-12}
HPLS HJ-WENO [23]	64	64	0.500	≈ 20000	4096	4096	2.89×10^{-3}	1.68×10^0
Mark-C-VOF [75]	64	64	1.000	≈ 4000	4096	4096	3.23×10^{-4}	5.95×10^{-2}
A-SLEIPNNIR	64	2	0.640	50000	1626	3265	2.81×10^{-5}	1.17×10^{-1}
iPAM linear h^2 [28]	64	64	1.000	N/A	4096	4096	1.74×10^{-7}	Machine
iPAM cubic $5h^2$ [29]	64	64	1.000	N/A	4096	4096	1.97×10^{-8}	Machine
EMFPA- V^{cor} [67]	≈ 128	≈ 128	0.500		15886	8112	1.02×10^{-2}	Machine
Rider–Kothe (Puckett) [72]	128	128	1.000		16384	16384	1.44×10^{-3}	N/A
HPLS HJ-WENO [23]	128	128	0.500	≈ 80000	16384	16384	1.40×10^{-3}	7.90×10^{-1}
CCU [27]	128	128	1.000	N/A	16384	16384	1.00×10^{-3}	Machine
SLPLS [24]	128	128	4.900	≈ 20000	16384	16384	9.73×10^{-4}	7.30×10^{-1}
NBLR-LS WENO [31]	128	128	1.000		>16384	>16384	7.00×10^{-4}	6.80×10^{-1}
ACLSVOF-A [71]	≈ 128	10	N/A		2246	2246	5.09×10^{-4}	1.30×10^{-4}
AMR-MOF [32]	128	32	4.000		>1672	>1672	5.04×10^{-4}	7.09×10^{-13}
Mark-C-VOF [75]	128	128	1.000	5813	16384	16384	4.06×10^{-5}	7.38×10^{-3}
A-SLEIPNNIR	128	2	1.280	50000	2780	5573	2.83×10^{-5}	1.40×10^{-5}
iPAM linear h^2 [28]	128	128	1.000	N/A	16384	16384	1.17×10^{-8}	Machine
iPAM cubic $5h^2$ [29]	128	128	1.000	N/A	16384	16384	7.92×10^{-10}	Machine

states of the simulation; the number of elements (cells, in VOF methods) and nodes at the maximum time of deformation ($t = 4$); and the percentage of relative loss or gain in area between those instants is shown in Table 3. We notice the excellent results by the Narrow-Band, Locally-Refined Level Set method by Gómez and co-workers [31], while the Adaptive Coupled Level-Set Volume-Of-Fluid method by Yang and collaborators [71] further improves them at a lower computational cost; only the groundbreaking Adaptive Moment-Of-Fluid approach by Ahn & Shashkov [32], and the mixed Marker-Volume-Of-Fluid (and its enhanced, locally conservative version) by Aulisa et al. [75,76] are able to provide better error values which, in the latter case, come at the price of a notably higher computational cost. And then, there is the iPAM method by Zhang and Fogelson, which, as it happened in the solid-body rotation test, performs at another level of accuracy due to its fourth-order convergence with uniform spatial refinement. Besides, the recent unsplit VOF method (CCU) proposed by Comminal and co-workers [27], though not as accurate as the previous methods, stands out for its simplicity (in contrast with some convoluted procedures for marker redistribution required in [75]) and automated merging/breaking-up of the interface. An-

图 4: 西班牙马德里理工大学的 J. Carpio 教授和同事在 2019 年《J. Comput. Phys.》上比较了当前有代表性的界面追踪方法的精度和体积守恒性质; 表中结果相关的标准测试为涡量剪切试验 (single vortex flow); 见“关键技术突破情况”中图 2。在这些被比较的方法中, VOF 方法有 Rider–Kothe (Puckett)^[18]、CCU^[6]、Stream (Puckett)^[12]、EMFPA- V^{cor} ^[13]; VOF 和 LS 的混合方法有 ACLSVOF-A^[20]; FT 和 VOF 的混合方法有 Mark-C-VOF^[2]; 新一代自适应 VOF 方法有 AMR-VOF^[1]; FT 和 LS 的混合方法有 HPLS HJ-WENO^[7]、SLPLS^[8]、A-SLEIPNNIR^[17]; LS 方法有 NBLR-LS WENO^[11]。表中最后两列结果分别代表界面追踪误差和体积守恒误差; 其中“Machine”代表浮点机器精度, 即 2.2×10^{-16} 。表中黄色高亮部分为申请人和同事提出的界面追踪方法的结果, 这些结果明显比其他方法的结果要精确多个数量级。Carpio 教授在文字中的黄色高亮部分特别强调申请人方法的精度与其他方法不在一个水平上。