arXiv:2601.10134v1 [physics.comp-ph] 15 Jan 2026

一种用于求解具有界面跳跃条件的共轭标量传输的体积惩罚方法

Ming Liu、Yosuke Hasegawa*

创新模拟软件研究中心，工业科学研究所，东京大学，日本东京目黑区驹场*4-6-1*，邮编*153-8505*

摘要

在复杂界面几何上具有界面跳跃条件的共轭标量传输常见于热过程与化学过程中，但要实现准确且高效的模拟仍颇具挑战。本研究针对体积惩罚法（一种浸入边界法），开发了一种新颖的两相界面处理方法，用于求解具有一般界面边界条件的共轭标量传输问题。我们首先提出一种界面处理方法，用于求解具有诺伊曼边界条件的对流扩散方程，随后将其推广至同时存在界面通量跃变和标量跃变的一般共轭标量传输问题。通过求解一维扩散问题，验证了当前方案，并展示了该方案的优势：通过引入一个表示界面标量通量局部跃迁条件的附加源项，提高计算精度，并统一两相中的控制方程。随后，我们进一步将当前方案应用于流固耦合标量扩散问题，以及界面两侧标量及其通量均发生跃变的对流扩散问题。当前方案的模拟结果总体上与贴体网格模拟获得的参考结果吻合良好，平均相对偏差小于3.0%。

关键词：体积惩罚法；共轭标量传输；界面跃变条件

*通讯作者。

1. 引言

不同相中的共轭标量传输常见于各种工业过程。在不同相的界面处，标量或其通量可能发生跃变，在某些应用中不可忽略。典型例子包括：微通道中气固界面的热流跳跃[1], 由化学反应引起的界面标量通量跳跃 [2], 微尺度传热系统中流固界面因非平衡效应导致的温度跳跃 [3], 以及气液系统中的界面浓度跳跃 [4]。尽管共轭标量传输现象在热能与化学工程实践中十分普遍，但由于界面跳跃条件难以处理，尤其是在复杂几何中，其有效且准确的模拟仍然面临挑战。

对于采用贴体网格的数值模拟，通常会分别模拟不同的相，然后通过显式施加界面边界条件将其耦合起来。Zhang 等人 [5][6] 对膜式换热器中的共轭传热传质进行了模拟。随后，他们在空气-膜-溶液系统中进一步考虑了界面跳跃条件 [7], ，其中气液界面处存在由潜热通量导致的热流跳跃, 并采用交替方向隐式法求解耦合问题。近年来，浸入边界法（IBM）在复杂几何中的应用尤其受到关注 [8]。由于 IBM 可以将任意界面几何嵌入笛卡尔网格系统中，因此无需针对每种几何形状进行繁琐的网格生成。同时，网格点通常不位于界面上，因此难以准确施加界面边界条件。利用格子玻尔兹曼方法（LBM）处理复杂边界的优势，已有多位学者开发了用于具有一般界面条件的共轭标量传输的浸入边界格子玻尔兹曼方法。Hu 等人 [9][10] 提出了一种处理有跳跃和无跳跃的一般界面边界条件的格式 [11]。Mu 等人 [12] 针对具有狄利克雷和诺伊曼边界条件的共轭标量输运问题开发了一种界面处理方法 [13]。尽管浸入边界格子玻尔兹曼方法能够在平直界面上达到二阶精度，在曲面界面上达到一阶精度 [14], ，但由于需要在界面周围进行复杂的基于插值的处理，计算成本会显著增加。相比之下，有限体积框架下用于共轭标量传输的浸入边界格式相对较少。

Kumar 和 Natarajan 开发了一种基于体积占据函数的弥散界面浸入边界格式，用于求解共轭传热问题 [15], ；该方法同时求解流体区域和固体区域中的统一控制方程 [16]。然而，上述格式仅适用于不存在界面跳跃的共轭传热问题。此外，对于涉及相变材料的共轭传热问题，通常采用焓法 [17][18] ，将潜热纳入总焓，以处理相变过程中的焓跳跃。尽管焓法能够有效纳入由相变相关潜热导致的给定热流跳跃，但难以处理局部标量通量的任意跳跃。因此，仍有待开发有限体积法框架下用于处理一般界面跳跃条件的浸入边界格式。

为此，本研究引入了体积惩罚法（VPM），这是一种典型的弥散界面浸入边界法。受多孔介质数值模型的启发，Schneider 等人最初提出了 VPM [19][20]，将固体区域建模为渗透率足够低的多孔介质，并添加人工源项，使固体区域内的局部流体速度趋近于零。起初，VPM 用于施加狄里克雷边界条件，尤其是无滑移速度边界条件 [21][22]。随后，该方法进一步扩展，可用于处理诺伊曼 [23][24] 和罗宾条件 [25]。通常，VPM 通过添加源项来施加诺伊曼边界条件，使所关注变量的导数趋近于目标值 [26]。然而，由于惩罚作用于固体的整个体积，现有方案也会在固体区域内产生非物理解。因此，该方法不适用于求解流体相和固体相耦合的标量传递问题。此外，目前尚未建立在 VPM 中处理界面跳跃条件的数值方法。

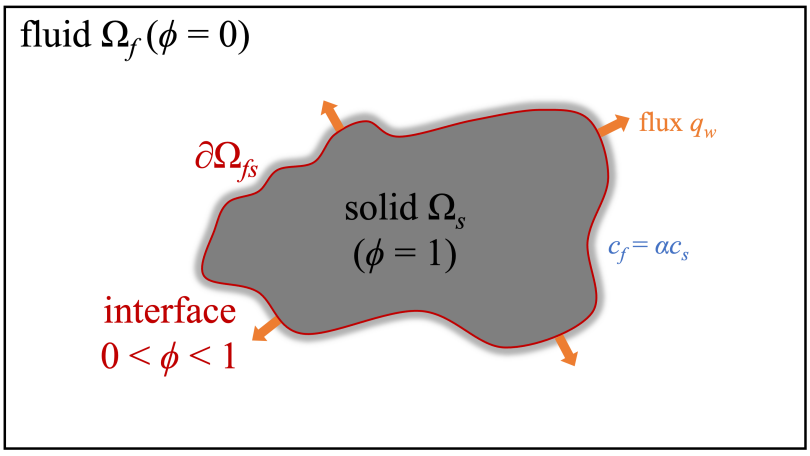
本研究旨在针对诺伊曼边界条件以及标量及其通量存在跃变的一般界面条件，开发一种用于VPM的新型界面处理方法。本文组织如下：第2节提出了具有界面跃变条件的共轭标量传输VPM。第3节采用一维扩散问题验证该方法对诺伊曼边界条件的处理效果，并将当前VPM与现有方案进行比较。第4节和第5节分别采用当前VPM对更一般的流体-固体标量扩散

以及对流扩散问题进行模拟，并将结果与采用贴体方法（BFM）进行模拟的结果进行比较。最后，第6节总结了本研究的结论。

2. 体积惩罚法

2.1. 问题描述

本文研究了流固区域 Ω 中标量c的共轭传输过程，例如浓度或温度，如图 1 所示。在全文中，下标f 和s分别表示流体区域和固体区域中的物理量。我们假设流固界面 $\partial\Omega_{fs}$处存在标量通量q_w 的局部跃变，该跃变可能由化学反应或蒸发、凝结产生的潜热引起，而这一额外的标量通量会导致流固界面处的标量通量跳跃。本文还考虑了流固界面处标量本身的不连续性。具体而言，我们假设界面处存在一个形式为常数乘数 α 的标量跃变，即$c_f = \alpha c_s$。例如， α 表示流体与固体之间的热容比，其中c 是共轭传热系统中的焓。此外，在气液界面传质的情况下， α 表示溶质浓度c的亨利常数。



F图 1：具有界面跳跃条件的共轭标量传输示意图。

用于描述上述共轭标量输运问题的控制方程及相应的界面边界条件如下所示：流体区域中的对流扩散方程和固体区域中的扩散方程：

流体区域：

$$\frac{\partial c_f}{\partial t} + \boldsymbol{u} \cdot \nabla c_f = \nabla \cdot \left(D_f \nabla c_f \right), \tag{1}$$

固体区域：

$$\frac{\partial c_s}{\partial t} = \nabla \cdot \left(D_s \nabla c_s \right). \tag{2}$$

界面处的边界条件表示为

$$\begin{cases} c_f = \alpha_s c_s, \\ -D_s \dfrac{\partial c_s}{\partial n} + q_w = -D_f \dfrac{\partial c_f}{\partial n}, \end{cases} \quad \text{on } \partial\Omega_{fs}, \tag{3}$$

其中，c、 $\boldsymbol{u}$、D、 $\boldsymbol{n}$ 分别为标量、流体速度矢量、该标量的分子扩散率，以及从固体指向周围流体的壁面法向量。

2.2. 水平集函数

在本研究中，采用水平集函数 ϕ_0 表示嵌入笛卡尔网格系统中的任意三维流固界面。水平集函数定义为距流固界面的有符号距离。该函数在界面上的值设为零，在固体区域 Ω_s中为正，在流体区域 Ω_f中为负。局部水平集函数 ϕ_0 的分布可通过下式转换为相指示函数 ϕ ，使得 $\phi = 0$ 在流体区域中， $\phi = 1$ 在固体区域中，而 $0 < \phi < 1$在中间的界面区域中。

$$\phi = \begin{cases} 0, & \phi_0 < -\delta, \\ \dfrac{1}{2} \sin\left(\dfrac{\phi_0}{\delta} \dfrac{\pi}{2} \right) + \dfrac{1}{2}, & -\delta \le \phi_0 \le \delta, \\ 1, & \phi_0 > \delta, \end{cases} \tag{4}$$

其中， δ 是流体区域与固体区域之间界面区域（$0 < \phi < 1$）的半宽度。借助水平集函数，流固界面可以表示为具有一定厚度的弥散界面区域

2δ。通常，界面半宽度 δ 设置为若干个局部网格点的宽度。因此，通过减小局部网格尺寸，界面区域会变窄，所得数值结果预计将收敛于无穷小界面厚度下的解。在当前模拟中，界面厚度由局部对角网格间距乘以常数系数K_δ确定，在本研究中将其设为1.5。图2示意性地展示了流固表面附近水平集函数 ϕ_0 及相应相指示函数 ϕ 的分布。相指示函数的梯度 $\frac{d\phi}{d\phi_0}$ 也进行了绘制，根据其定义，该梯度在界面区域上的积分为1。稍后将利用这一性质，使界面两侧的局部标量通量满足给定的跳跃条件。

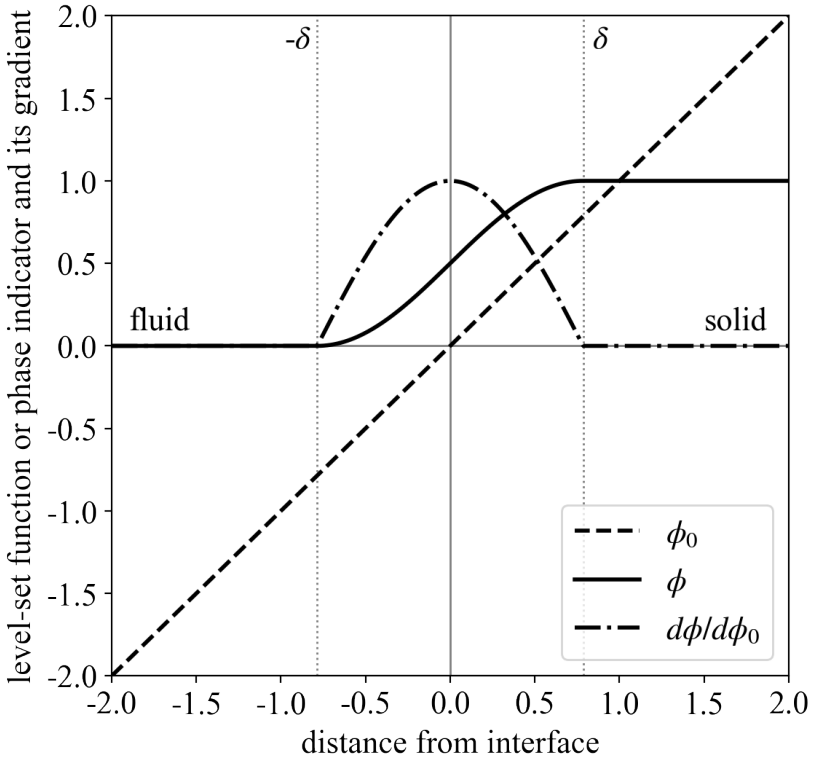


图 2：流固界面附近水平集函数 ϕ_0、相指示函数 ϕ 及其梯度 $\frac{d\phi}{d\phi_0}$ 的分布。

2.3. 用于诺伊曼条件的 *VPM*

为建立适用于带有界面跳跃条件的共轭标量输运问题的 VPM，首先考虑最基本的条件之一，即单一流体相中的诺伊曼边界条件。带诺伊曼边界条件的标量输运对流扩散方程可表示如下:

$$\frac{\partial c_f}{\partial t} + \boldsymbol{u} \cdot \nabla c_f = \nabla \cdot (D_f \nabla c_f), \tag{5}$$

$$\boldsymbol{q}_w = -D_f \frac{\partial c_f}{\partial n} = -D_f (\nabla c_f \cdot \boldsymbol{n}) \boldsymbol{n}, \qquad \text{on } \partial\Omega_f. \tag{6}$$

从壁面指向流体的壁面标量通量 $\boldsymbol{q}_w$ 可表示为壁面法向量 $\boldsymbol{n} = -\frac{\nabla\phi_0}{|\nabla\phi_0|}$（从固体向周围流体指向外侧）与其强度 q_w 的乘积:

$$\boldsymbol{q}_w = q_w \boldsymbol{n}. \tag{7}$$

需要注意的是，假设整个固体区域内 $c_s = 0$，这等价于第 2.1 节中定义的标量通量跳跃。

在现有的用于诺伊曼边界条件的 VPM [26] 中，其控制方程可写为:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \boldsymbol{u} \cdot \nabla c = \nabla \cdot (D_f \nabla c) - \eta\, \phi\, (D_f \nabla c \cdot \boldsymbol{n} + q_w), \tag{8}$$

其中，通过 VPM项（作为式（8）右端的最后一项），强制标量通量 $-D_f \nabla c \cdot \boldsymbol{n}$ 趋近于目标值 q_w。借助 VPM，流体区域和固体区域均通过统一控制方程（8）求解。由于 VPM项的作用，流体区域中实现了诺伊曼边界条件，而固体区域中也会产生并扩散非物理标量场。

图3(a)和(b)分别示意了界面周围标量通量的分布，以及沿从固体指向流体的壁面法向方向的分布曲线。具有跳跃条件的壁面法向标量通量 $q^\perp$ 可写为

$$q^\perp(\phi_0) = q_f^\perp - \left(q_f^\perp - q_s^\perp\right) H(\phi_0) = q_f^\perp - q_w\, H(\phi_0), \tag{9}$$

其中，下标f 和s 分别表示流体区域和固体区域中的物理量。$H(\phi_0)$为赫维赛德阶跃函数。通常，标量

沿壁面法向穿过界面发生跃变，会导致控制方程中出现源项，表示为

$$q_f^{\perp} - q_s^{\perp} = q^{\perp}(\phi_0 = 0^-) - q^{\perp}(\phi_0 = 0^+) = \int_{0^+}^{0^-} \frac{\partial q^{\perp}}{\partial \phi_0}\, d\phi_0. \tag{10}$$

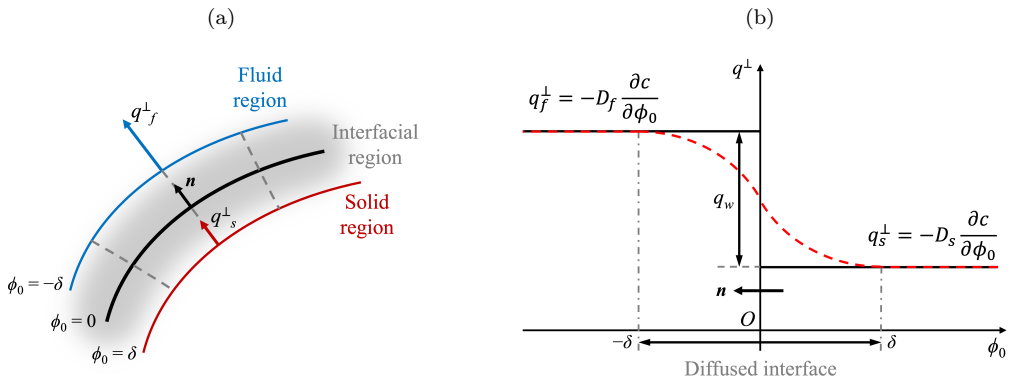


图3: （a）界面附近标量通量分布示意图；（b）标量通量分布曲线。

在本文的弥散界面VPM中，界面两侧 $q^{\perp}$ 的阶跃变化 $\phi_0 = 0$ （见图3(b)中的黑色实线）由从 $\phi_0 = -\delta$ 到 δ 的平滑过渡近似表示（见图3(b)中的红色虚线）。因此，可进一步推导由标量通量跳跃导致的标量输运方程中的源项 $\frac{\partial q^{\perp}}{\partial \phi_0}$ ：

$$\frac{\partial q^{\perp}}{\partial \phi_0} = \frac{\partial \left(-q_w H\right)}{\partial \phi_0} = -q_w\, \delta(\phi_0) \approx \nabla \cdot \left(q_w\, \phi\, \boldsymbol{n}\right). \tag{11}$$

此处， $\delta(x)$ 是一个在流固界面两侧变化的一维狄拉克δ函数。假设界面厚度足够小，则用 $-\nabla \cdot \left(\phi\, \boldsymbol{n}\right)$ 对该狄拉克δ函数进行近似。负号的出现是因为我们将壁面法向量定义为水平集函数梯度的反方向。注意，随着界面附近的网格间距减小， $-\nabla \cdot \left(\phi\, \boldsymbol{n}\right)$ 会收敛到狄拉克δ函数 $\delta(\phi_0)$，因此界面区域会变窄。换言之，当前方案在狭窄的界面区域内引入一个源项，使得

其沿界面的积分对应于壁面法向方向上的局部标量通量跳跃。

因此，对于界面标量通量跳跃q_w，新提出的 VPM 方程可写为:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \boldsymbol{u} \cdot \nabla c = \nabla \cdot (D \nabla c) + \nabla \cdot \big(q_w \, \phi \, \boldsymbol{n}\big). \tag{12}$$

这里，标量的分子扩散率在各相中定义为

$$D(\phi_0) = \begin{cases} D_f, & \phi_0 < 0, \\ D_s = 0, & \phi_0 \geq 0. \end{cases} \tag{13}$$

注意，对于标量通量发生界面跃变的情况，式 (12) 右端项中新出现的最后一个 VPM项仅在界面区域内具有非零值，因此可在流体区域和固体区域内重现原始控制方程。

当前 VPM项（式 (11)）的一个独特特点是它采用散度形式，因此可以精确控制其在界面上的积分。具体而言，将其从 $\phi_0 = -\delta$ 积分到 δ，可得

$$\begin{aligned} 0 &= \int_{-\delta}^{\delta} \big[\nabla \cdot (D \nabla c) + \nabla \cdot (q_w \, \phi \, \boldsymbol{n})\big] \, d\phi_0 \\ &= \big(-D_f \nabla c \cdot \boldsymbol{n}\big)_{\phi_0 = -\delta} - \big(-D_s \nabla c \cdot \boldsymbol{n}\big)_{\phi_0 = \delta} + \big[q_w \phi(-\delta) - q_w \phi(\delta)\big] \\ &= q_f^{\perp} - q_s^{\perp} - q_w. \end{aligned} \tag{14}$$

这表明，标量通量跳跃q_w 始终可以在界面区域内实现。

式 (12)–(13) 中当前VPM 相较于式 (8) 中传统方案的优势有两点。首先，由于 $-\nabla \cdot \big(\phi \, \boldsymbol{n}\big)$ 的体积分按定义为 1，因而可以精确施加指定的标量通量q_w。其次，固体内部的分子扩散率设为零，因此施加的标量通量只会扩散到流体中。

2.4. 一般共轭标量传输的 *VPM*

接下来，我们将当前VPM扩展到具有界面跃变条件的共轭标量传输问题。为了建立适用于流体和固体区域的统一控制方程，定义一个等效标量h，其来源为

原始标量c，定义如下:

$$h = \alpha c, \tag{15}$$

其中，等效系数 α 在流体区域中等于 1，在固体区域中等于 α_s。通过引入等效标量，消除了流固界面处原有的标量跃变，从而可以通过统一控制方程求解流固耦合区域。因此，流固界面处的边界条件可改写为以下形式:

$$\begin{cases} h_f = h_s, \\ -D_s \dfrac{\partial h_s}{\partial n} + q_w^* = -D_f \dfrac{\partial h_f}{\partial n}, \end{cases} \quad \text{on } \partial\Omega_{fs} \tag{16}$$

其中，等效通量跃变q_w^* 仍然存在，其表达式为

$$q_w^* = D_s \left(1 - \frac{1}{\alpha_s}\right) \frac{\partial h_s}{\partial n} + q_w = D \left(1 - \frac{1}{\alpha}\right) \frac{\partial h}{\partial n} + q_w. \tag{17}$$

于是，等效通量跃变的统一表达式可写为

$$q_w^* = D \left(1 - \frac{1}{\alpha}\right) \frac{\partial h}{\partial n} + q_w, \tag{18}$$

其中，等效系数设为

$$\alpha(\phi_0) = \begin{cases} \alpha_f = 1, & \phi_0 < 0, \\ \alpha_s, & \phi_0 \geq 0. \end{cases} \tag{19}$$

根据第 2.3 节中针对诺伊曼边界条件提出的新 VPM，可将具有界面标量通量跃变边界条件的共轭标量传输统一控制方程表述为:

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \boldsymbol{u} \cdot \nabla h = \nabla \cdot (D \nabla h) + \nabla \cdot \left(q_w^* \, \phi \, \boldsymbol{n}\right). \tag{20}$$

分子扩散率的取值取决于关注点位于流体区域还是固体区域，这可以根据水平集函数的局部值符号来判断，

$$D(\phi_0) = \begin{cases} D_f, & \phi_0 < 0, \\ D_s, & \phi_0 \geq 0. \end{cases} \tag{21}$$

该格式基于有限体积法，在开源代码 OpenFOAM（第8版）中实现。对流、扩散和梯度项的离散化采用二阶线性格式。瞬态项采用欧拉隐式格式。

2.5. 误差分析

尽管如第2.3节所述，平面界面满足跳跃条件式（14），但界面曲率还会导致另一类误差。为分析这一点，我们考虑一个有限厚度界面，其两个主曲率半径分别为R_ψ 和R_θ ，分别沿方位 ψ和极 θ 方向，如图4所示。控制体（C.V.）边界沿壁面法向的净标量通量可推导为

$$\begin{aligned}\iint_{\partial\text{C.V.}} q^\perp \, dS &= q_f^\perp (R_\psi + \delta)(R_\theta + \delta)\, \Delta\psi\, \Delta\theta - q_s^\perp (R_\psi - \delta)(R_\theta - \delta)\, \Delta\theta\, \Delta\psi \\ &= (q_f^\perp - q_s^\perp)(R_\psi R_\theta + \delta^2)\, \Delta\theta\, \Delta\psi + (q_f^\perp + q_s^\perp)(R_\psi + R_\theta)\, \delta\, \Delta\theta\, \Delta\psi. \end{aligned} \tag{22}$$

随着界面半宽度 δ 趋于零，当不存在标量通量跳跃时，式（22）将趋于零，即 $q_f^\perp = q_s^\perp$。当存在标量通量跳跃时，第一项不会消失，而应与 VPM源项平衡。控制体（C.V.）内 VPM项的体积分可计算为

$$\begin{aligned}\iiint_{\text{C.V.}} \nabla \cdot \big(q_w\, \phi\, \boldsymbol{n}\big)\, dV &= \frac{q_w}{2\delta} \int_{-\delta}^{\delta} \Big[(R_\psi + \delta)(R_\theta + \delta) - (R_\psi - \delta)(R_\theta - \delta)\Big]\, \Delta\psi\, \Delta\theta\, d\phi_0 \\ &= q_w \big(R_\psi R_\theta + \tfrac{1}{3}\delta^2\big)\, \Delta\theta\, \Delta\psi. \end{aligned} \tag{23}$$

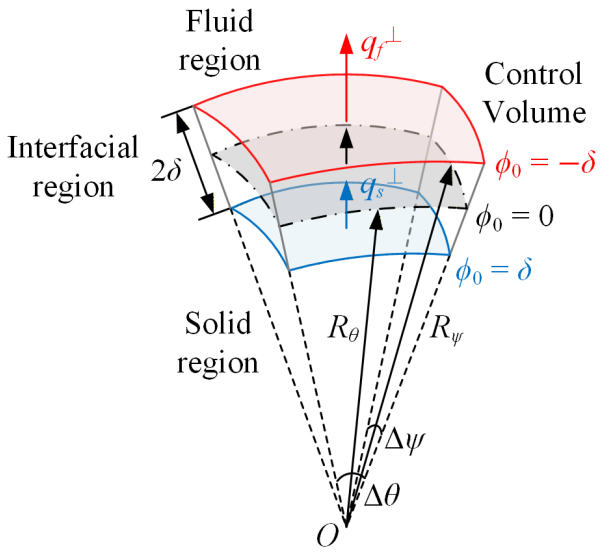


图 4：界面区域上控制体的示意图。此处，ψ 和 θ 分别表示三维极坐标系中的方位方向和极向，其对应的曲率半径分别为R_ψ 和R_θ，原点为O。

控制体内，式（23）中 VPM项的体积分与式（22）中穿过边界的标量通量应满足如下守恒关系：

$$\begin{aligned} 0 &= \iiint_{\text{C.V.}} \nabla \cdot \left(q_w\, \phi\, \boldsymbol{n}\right) dV - \iint_{\partial\text{C.V.}} q^\perp\, dS \\ &= \left(q_w - (q_f^\perp - q_s^\perp)\right)\left(R_\psi R_\theta + \tfrac{1}{3}\delta^2\right)\, \Delta\theta\, \Delta\psi \\ &\quad - (q_f^\perp - q_s^\perp)\, \tfrac{2}{3}\delta^2\, \Delta\theta\, \Delta\psi - (q_f^\perp + q_s^\perp)(R_\psi + R_\theta)\, \delta\, \Delta\theta\, \Delta\psi. \end{aligned} \tag{24}$$

流体侧与固体侧的标量通量差与相应标量通量跳跃之间的误差可计算为

$$q_w - \left(q_f^\perp - q_s^\perp\right) = \frac{(q_f^\perp + q_s^\perp)(R_\psi + R_\theta)}{R_\psi R_\theta + \frac{1}{3}\delta^2}\, \delta + \frac{\frac{2}{3}(q_f^\perp - q_s^\perp)}{R_\psi R_\theta + \frac{1}{3}\delta^2}\, \delta^2. \tag{25}$$

式（25）中的第一项表明，跳跃条件相对于界面半宽度 δ满足一阶精度。考虑到 δ 被设为$K_\delta\Delta$，其中 Δ 表示局部对角网格间距，这进一步

表明 VPM源项的误差相对于网格尺寸具有一阶精度。式（25）还表明，当平面界面的R_ψ 和R_θ 趋于无穷大时，右端项变为零。正如 Brown-Dymkoski 等人 [26], 所述，不包含跳跃条件的传统 VPM方法具有一阶精度；上述分析表明，即使加入界面跳跃条件，也能达到相同的精度阶数。

3. 验证

本节研究一维扩散问题，以验证本文 VPM 对诺伊曼边界条件的处理精度。

3.1. 一维扩散问题

本文考虑图 5 所示单一流体相中的瞬态一维扩散问题。底壁施加零标量通量条件，顶壁则施加大小为 $2d$ 的恒定标量通量。此处取半通道宽度 $d/2$ 作为无量纲化的特征长度。

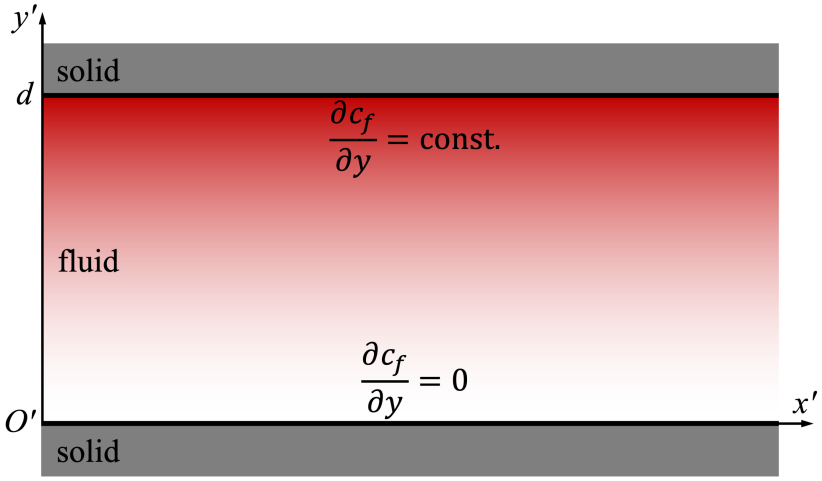


图 5：一维扩散问题示意图。

构建尺寸为 $[0, 6]\times[0, 8]$ 的二维计算域，以模拟一维扩散问题，随后生成笛卡尔网格。为了展示 VPM 对任意

不与笛卡尔网格对齐的界面的适应能力，如图6所示，流体区域倾斜了 30° 角。这里，x 和y 表示计算域的坐标，而x'和y'则表示沿顶部和底部壁面的切向和法向方向对齐的坐标。为捕捉固体边界附近标量场的快速变化，采用基于水平集函数局部值的自动网格加密（AMR），以细化流固界面周围的网格分辨率。

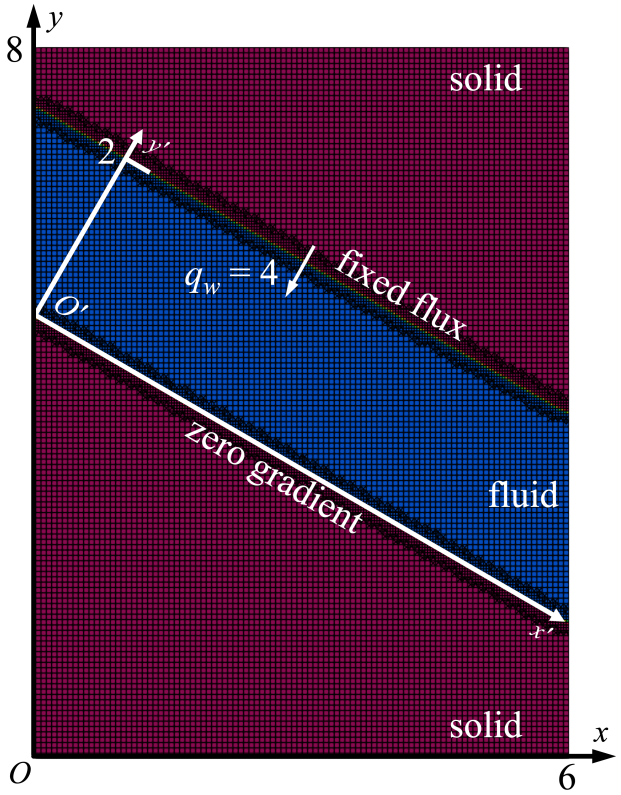


图 6：倾斜流体区域中采用笛卡尔网格的一维扩散问题的计算域。

单一流体相中的这一维扩散问题可由以下数学模型描述：

$$\frac{\partial c_f(t,y')}{\partial t} = D_f \frac{\partial^2 c_f(t,y')}{\partial {y'}^2}, \qquad 0 \le y' \le d, \quad t \ge 0, \tag{26}$$

底壁和顶壁上的边界条件为：

$$\left.\frac{\partial c_f(t,y')}{\partial y'}\right|_{y'=0} = 0, \tag{27}$$

$$\left.\frac{\partial c_f(t,y')}{\partial y'}\right|_{y'=d} = 2d. \tag{28}$$

为简化标量分布的解析解，顶壁上的标量通量定义为通道宽度的两倍。标量的初始条件设为以下抛物线分布：

$$c_f(0,y') = {y'}^2. \tag{29}$$

根据控制方程（26）以及相应的边界条件（27-28）和初始条件（29），标量分布的解析解为

$$c_{\mathrm{ANL}}(t,y') = 2D_f t + {y'}^2. \tag{30}$$

按照第 2.3 节提出的当前VPM，壁面标量通量作为附加源项纳入控制方程，形式如下：

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D\frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + \nabla\cdot\left(q_w\,\phi\,\boldsymbol{n}\right), \tag{31}$$

其中，顶壁$y'=d$上的标量通量跳跃设为$q_w = 2Df\,d$，符合边界条件方程（28）。相依赖的扩散率定义为：

$$D = \begin{cases} 0, & y'<0 \text{ or } y'>d, \\ D_f, & 0\le y'\le d. \end{cases} \tag{32}$$

将其在固体内部设为零，可确保标量仅在流体区域内扩散。

3.2. 网格收敛性

通过将网格尺寸 Δx逐渐从 0.06 减小至 0.008，对网格收敛性进行了系统研究。将当前VPM得到的模拟结果与解析解进行比较以检验精度，并定义如下相对误差，

$$e = \int_0^1\int_0^d \left|\frac{c^{\mathrm{VPM}}(t,y') - c^{\mathrm{ANL}}(t,y')}{c^{\mathrm{ANL}}(t,y')}\right| dy'\,dt, \tag{33}$$

其中，上标 VPM 和解析解分别表示当前模拟和解析解 (30) 的结果。这里，由于采用 VPM 进行二维模拟，结果 $c^{\mathrm{VPM}}(t,\ y')$ 通过沿 y'方向取平均值，计算为 x'方向的函数，

$$c^{\mathrm{VPM}}(t, y') = \frac{1}{L_{x'}} \int_l c^{\mathrm{VPM}}(t, x', y')\, dx'. \tag{34}$$

图7总结了当前VPM在不同网格尺寸下的相对误差。图7中的红色虚线表示一阶精度，即$e\ \propto \Delta x$，这与已有的VPM [26]相同。

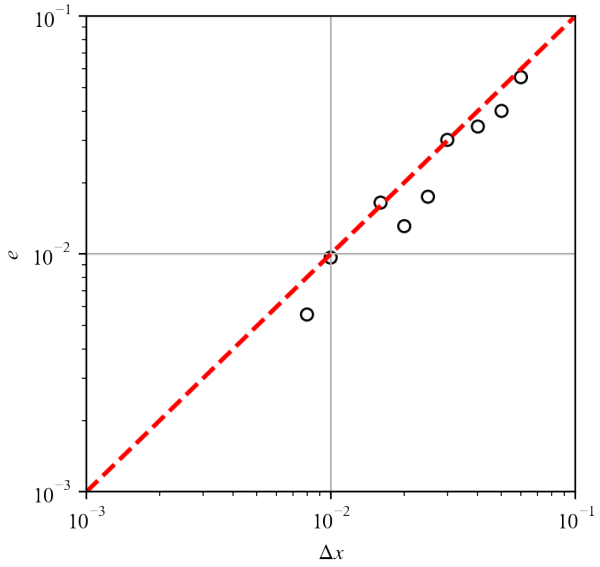


图7：不同网格下的相对误差。

3.3. 模拟结果

根据第 3.2 节的网格收敛性研究结果，以下分析采用网格尺寸 $\Delta x = 0.02$，以兼顾计算成本和精度。图 8 展示了当前VPM与不同流体分子扩散率 D_f下解析解的对比。由于此处考虑的是瞬态问题，因此绘出了初始时段$t = 0.2$ 至$t = 1.0$内标量分布随时间的演变。两者吻合良好，

如图 8 左列所示，在不同扩散率下，模拟结果与解析解总体上吻合良好。进一步的定量分析表明，分子扩散率$D_f = 0$.2、0.4、0.6、0.8、1.0对应的相对误差分别为 1.22%、1.17%、1.23%、1.29% 和 1.34%，平均值为 1.25%。文献[26] 中已有的 VPM 也在 OpenFOAM 中实现，并采用相同网格在相同条件下进行了模拟。模拟结果如图 8 右列所示。当前VPM和已有VPM方法的相对误差已计算并汇总于表1。

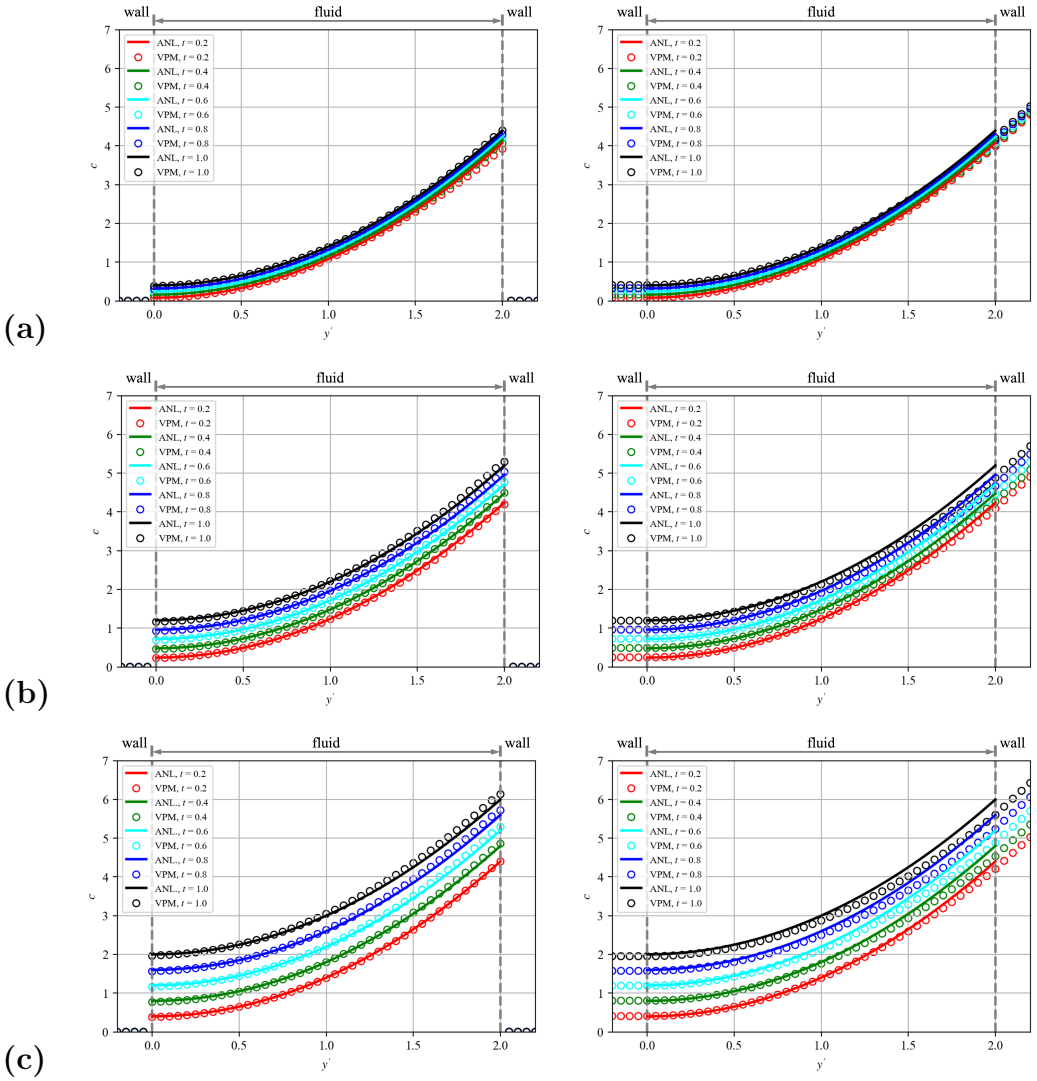


图8：当前VPM在不同流体分子扩散率Df = 下的模拟结果：(a) 0.2、(b) 0.6 和 (c) 1.0。左列和右列分别绘制了使用当前VPM方法和现有VPM方法得到的结果。

表1：当前方案和VPM方法的相对误差。

	$D_f = 0.2$	$D_f = 0.4$	$D_f = 0.6$	$D_f = 0.8$	$D_f = 1.0$	**Mean**
当前方案	1.22%	1.17%	1.23%	1.29%	1.34%	**1.25%**
现有方案	1.02%	1.64%	2.20%	2.68%	3.08%	**2.12%**

从图 8 右列可以看出，使用现有 VPM 时，固体区域（$y' < 0$和$y' > 2$）内也出现了标量分布；而如图 8 左列所示，当前方案中该分布始终严格为零。这是因为现有方案中的 VPM源项不仅在界面区域内取非零值，在固体区域内也取非零值。如表1所示，对于当前方案，在不同扩散率下，其相对误差几乎保持在同一水平。相比之下，现有方案的相对误差随着分子扩散率的增大而逐渐上升。这可能是由于随着扩散率增大，固体区域内非物理分布的范围显著扩大。在考虑流固耦合问题时，固体区域内产生非物理分布并不合适，后文将对此进行说明。

4. 流固耦合扩散问题

本节将第 3 节提出的诺伊曼边界条件 VPM 进一步扩展到具有界面跳跃条件的流固耦合问题。

4.1. 问题描述

本文考虑一个二维瞬态共轭传输问题，如图 9 所示：标量c在流固耦合区域中扩散，且界面标量及其通量存在跳跃。半径为$r = 0.1$ 的实心圆柱位于单位尺寸为 [-0.5, 0.5]×[-0.5, 0.5]的正方形计算域中心。坐标原点定义在圆柱中心。假设界面处存在恒定标量通量跳跃q_w 。这可能对应于因化学反应或相变而在界面处持续生成或耗散标量的情形。本文还考虑界面处标量的不连续性，其乘数因子为 α_s 。计算域的四条边界均施加零标量通量条件。该问题可表述如下：

$$\begin{cases} \dfrac{\partial c_f}{\partial t} = \nabla \cdot \big(D_f \nabla c_f\big), & \text{in } \Omega_f, \\ \dfrac{\partial c_s}{\partial t} = \nabla \cdot \big(D_s \nabla c_s\big), & \text{in } \Omega_s, \end{cases} \tag{35}$$

满足以下边界条件:

$$\begin{cases} c_f = \alpha_s c_s, & \\ -D_s \left.\dfrac{\partial c}{\partial n}\right|_s + q_w = -D_f \left.\dfrac{\partial c}{\partial n}\right|_f, & \text{on } \partial\Omega_{fs}, \\ c_f = 1, & \text{on } \partial\Omega, \end{cases} \tag{36}$$

以及以下初始条件:

$$\begin{cases} c_f(t=0) = 1, & \text{in } \Omega_f, \\ c_s(t=0) = \dfrac{1}{\alpha_s}, & \text{in } \Omega_s. \end{cases} \tag{37}$$

当不存在标量通量跳跃q_w时，此初始条件对应于平衡态，因此当$q_w = 0$时，标量场不会发生变化。需要注意的是，尽管我们在当前问题中假设标量通量跳跃为恒定值，但该方法也可轻松扩展至具有时变标量通量跃变的问题。

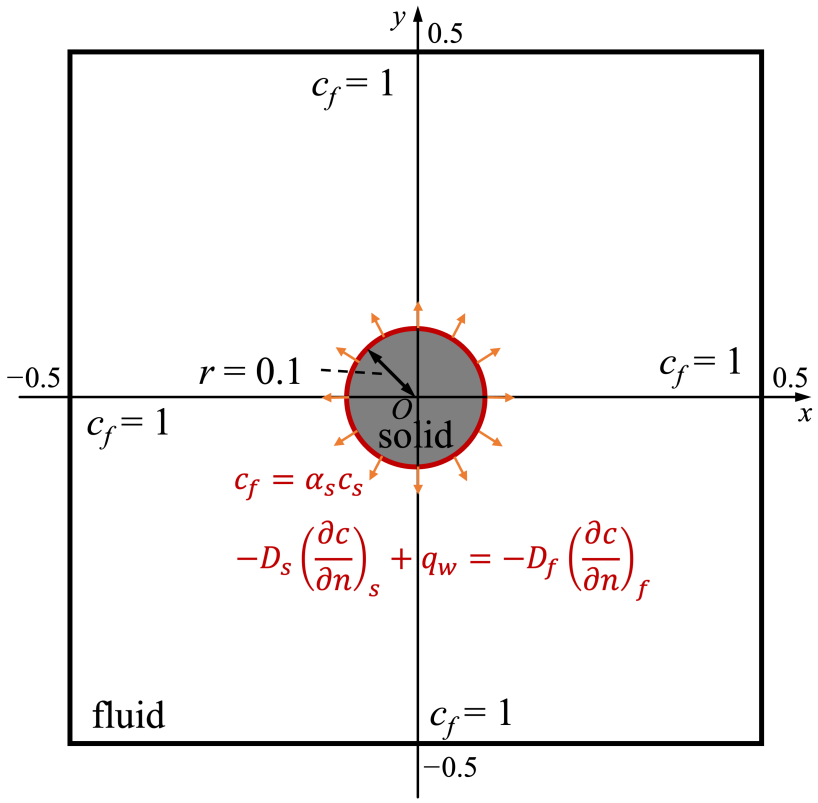


图 9：流固耦合扩散问题示意图。白色和灰色区域分别表示流体相和固体相，红色圆圈表示流固界面。橙色箭头表示界面上恒定标量通量q_w 的均匀分布。

两相中的统一VPM控制方程可写为

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \nabla \cdot (D \nabla h) + \nabla \cdot \left(q_w^* \, \phi \, \boldsymbol{n}\right) \tag{38}$$

，其中界面标量通量的跳跃定义如下：

$$q_w^* = D\left(1 - \frac{1}{\alpha}\right)\frac{\partial h}{\partial n} + q_w. \tag{39}$$

相依赖的等效系数 α 和分子扩散率D分别遵循式 (19) 和式 (21) 中的相同定义。

总共考虑四种情形，如表2所示。在这四种情形中，情形 1 和情形 2 对应于仅存在标量

通量跳跃的情况，即 $\alpha_s = 1$；而另外两种情形（情形 3 和情形 4）则考虑标量及其通量均存在跳跃的情况。

表2：流固耦合扩散案例设置。

	D_f	D_s	α_s	q_w	**相对偏差**
案例1	0.01	0.05	1.0	1.0	2.91%
情形 2	0.05	0.01	1.0	1.0	1.23%
情况3	0.01	0.05	0.8	1.0	0.85%
案例4	0.01	0.05	1.25	1.0	0.85%

4.2. 网格分辨率和时间步长的收敛性研究

当前VPM采用带有第一级自适应网格加密的笛卡尔网格。为验证该方法，还使用 OpenFOAM 的标准内置求解器 chtMultiRegionFoam 进行了相应的 BFM 模拟。笛卡尔网格和贴体网格的分布如图 10 所示。在案例4中，分别对 VPM 和 BFM 进行了网格收敛性研究，结果分别汇总于表 3 和表 4。对于 VPM，沿 x 和y 方向的笛卡尔网格分辨率逐步提高，$N_x \times N_y = 100\times100$, 150×150, 200×200, 250×250 和 300×300。对于 BFM，网格点总数也依次增加至 17,700、30,596、48,400、68,336 和 93,700。对于每种网格，均以最精细网格所得的模拟结果作为参考。相对于最精细网格结果的相对偏差定义为

$$\text{相对偏差} = \int_0^1 \int_{-0.5}^{0.5} \frac{\left| c(t,\ x,\ y=0) - c^{\text{finest}}(t,\ x,\ y=0) \right|}{\left| c^{\text{finest}}(t,\ x,\ y=0) \right|} dx\, dt, \tag{40}$$

其中，上标“finest”表示采用最细网格得到的模拟结果。对于细于 200×200 的笛卡尔网格和细于48,400的贴体网格，相对偏差均小于0.5%，因此后续分析采用这两种网格。此外，采用不同分辨率的笛卡尔网格时，沿$y = 0$ 方向的标量分布

以及贴体网格时的标量分布如图11所示。图11(a)表明，随着笛卡尔网格不断加密，VPM结果逐渐收敛至BFM结果。

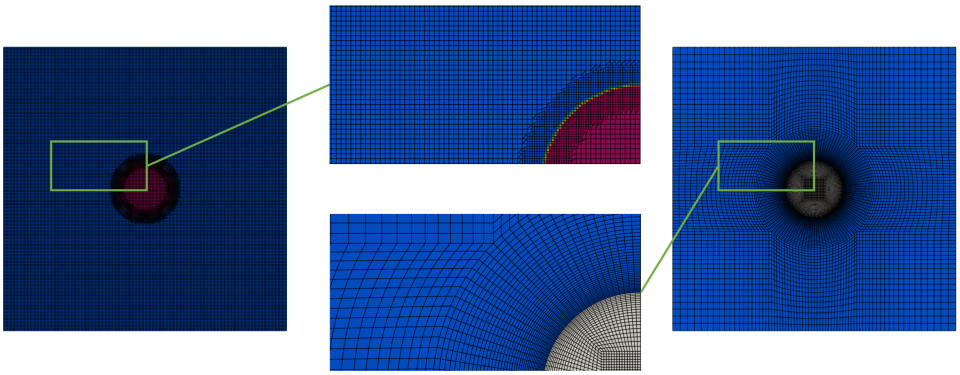


图10：当前VPM（左）和BFM（右）所使用的计算网格。

表3：VPM的网格收敛性检查。

$N_x \times N_y$	**最小网格尺寸** 自适应网格细化后	**网格数量** 自适应网格细化后的点数	**相对偏差** 最精细网格结果
100×100	0.0050	22,368	1.45%
150×150	0.0033	48,624	0.67%
200×200	0.0025	87,128	0.43%
250×250	0.0020	131,040	0.31%
300×300	0.0017	187,200	0.00%

表 4：BFM 的网格收敛性检查。

网格点数量	相对于 最精细网格结果的
17,700	3.74%
30,596	2.37%
48,400	0.47%
68,336	0.30%
93,700	0.00%

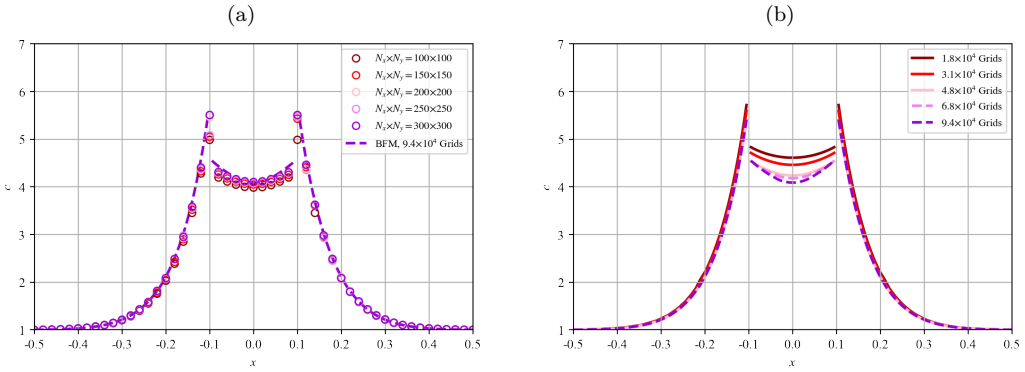


图11：不同分辨率的（a）笛卡尔网格和（b）贴体网格上，沿直线$y = 0$处$t = 1.0$的标量分布。在图11(a)中，还以虚线绘出了采用最细网格得到的BFM结果，作为参考。

还研究了当前VPM中时间步长的影响，考察了仅存在标量通量跳跃的案例1，以及标量及其通量均存在跳跃的案例4。相对于采用最小时间步长所得结果的相对偏差汇总于表5中。这里，相对于采用最小时间步长得到的模拟结果的相对偏差定义如下：

$$\text{relative deviation} = \int_0^1 \int_{-0.5}^{0.5} \left| \frac{c(t,x,y=0) - c^{\text{smallest}}(t,x,y=0)}{c^{\text{smallest}}(t,x,y=0)} \right| dx\, dt, \tag{41}$$

w此处上标“最小”指的是具有

最小时间步长的模拟结果。图12展示了采用不同时间步长时，沿直线$y = 0$ 的标量分布。结果表明，对于仅存在标量通量跳跃的情况，时间步长为 1×10^{-4} 时即可获得收敛结果；而当标量及其通量均发生跳跃时，则需要更小的时间步长 1×10^{-5}。

表5：瞬态时间步长对模拟结果的影响。

	相对于使用最小时间步长所得结果的相对偏差	
瞬态时间步长	**案例1**	**案例4**
1×10^{-3}	1.16%	3.04%
5×10^{-4}	0.82%	2.58%
1×10^{-4}	0.61%	2.18%
5×10^{-5}	0.49%	1.48%
1×10^{-5}	0.37%	0.79%
5×10^{-6}	0.00%	0.00%

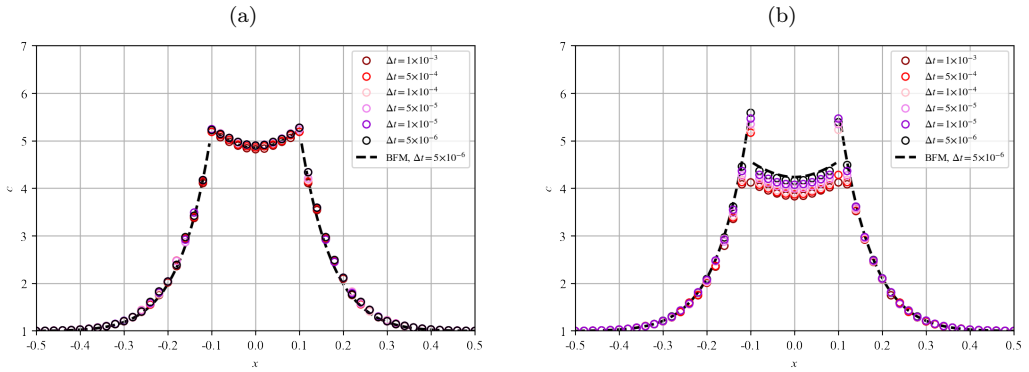


图12：沿直线 $y = 0$ 在 $t = 1.0$ 处的标量分布，(a) 案例1 和 (b) 案例4 使用不同时间步长时的结果。作为参考，还以虚线绘制了使用最小时间步长得到的 BFM 结果。

4.3. 结果与讨论

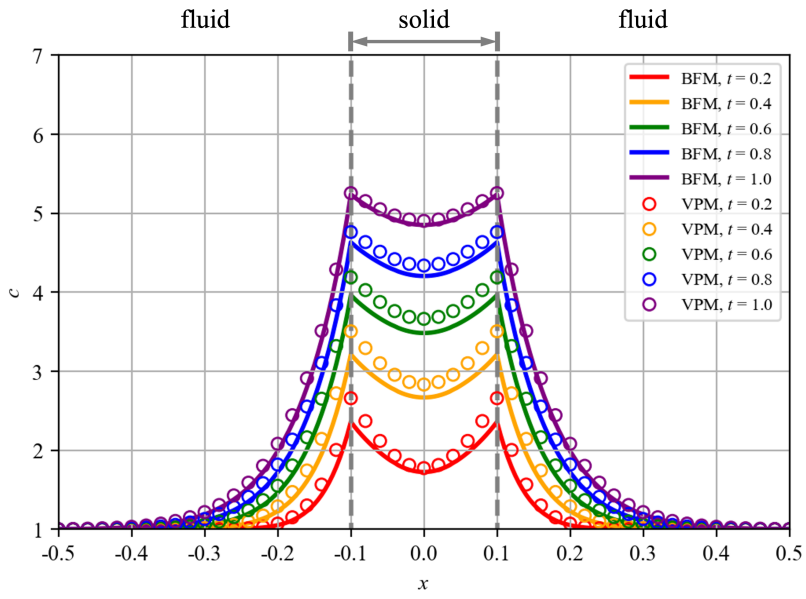
沿直线$y = 0$，下文定义的 VPM 与 BFM 结果之间的相对偏差见表2。

$$\text{relative deviation} = \int_0^1 \int_{-0.5}^{0.5} \left| \frac{c^{\text{VPM}}(t, x, y = 0) - c^{\text{BFM}}(t, x, y = 0)}{c^{\text{BFM}}(t, x, y = 0)} \right| dx\, dt, \tag{42}$$

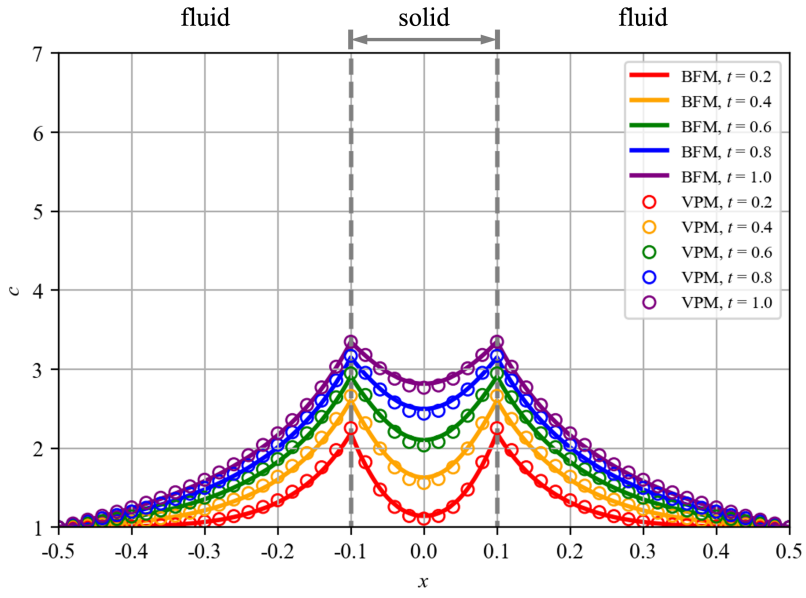
其中，VPM 和 BFM 的上标分别表示由 VPM 和 BFM 得到的模拟结果。如表2所示，所有四种情况中 VPM 与 BFM 之间的相对偏差均在 3.0% 以内，平均值为 1.46

图13展示了四种情况下沿$y = 0$方向标量随时间的演化。当前VPM的结果与BFM所得结果吻合良好，这验证了当前VPM的准确性。如图13所示，最大偏差始终出现在界面处（x =-0.1, 0.1），这也会影响固体区域（-0.$1 < x < 0$.1）内的模拟精度。尽管如此，流体区域（-0.$5 < x <$ -0.1 和 0.$1 < x < 0$.5）内的标量分布仍能得到准确模拟，且固体区域内的结果与BFM结果一致。由于VPM是一种弥散界面浸入边界法，界面区域内的精度通常无法得到保证。然而，随着网格加密、界面区域厚度减小，计算结果最终将收敛于BFM的预测结果，如图11(a)所示。

(a)

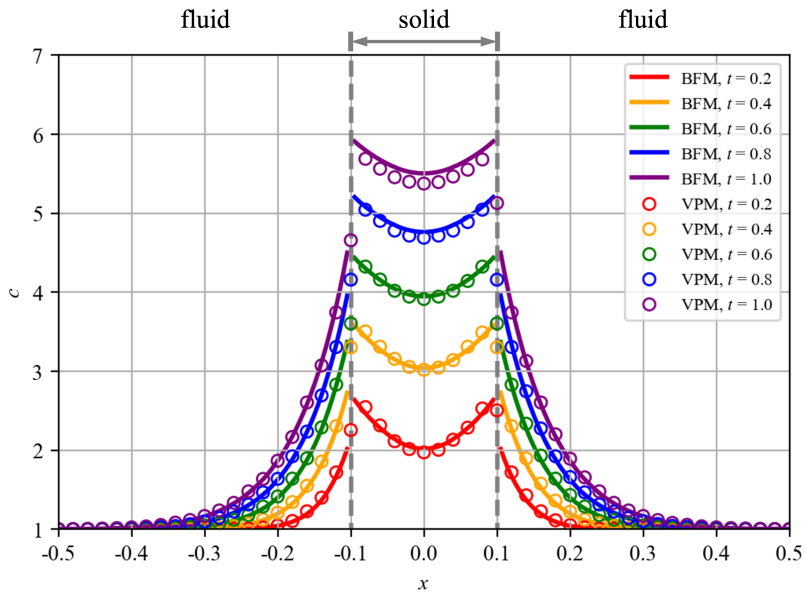


(b)

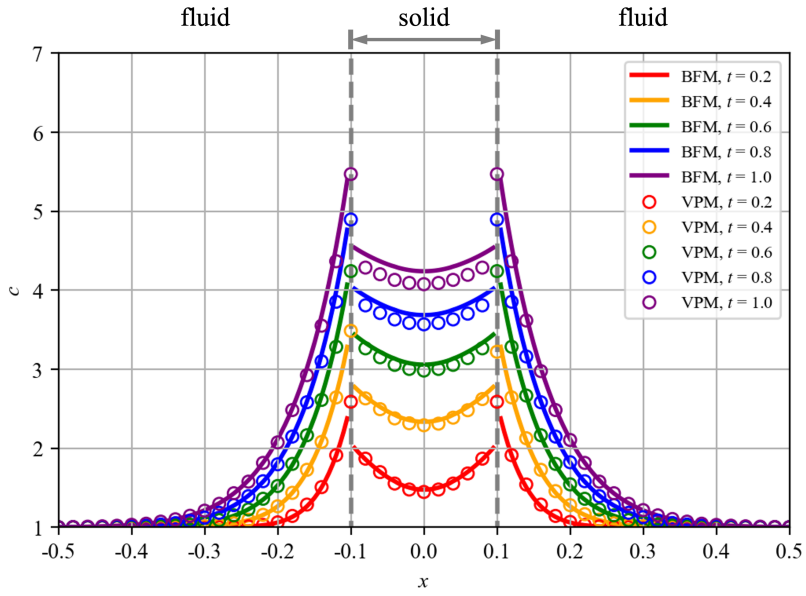


Fi图13：沿$y = 0$ 线的标量分布，其中(a)为案例1，(b)为情形 2。

(c)



(d)



Fig图13：沿$y = 0$ 线的标量分布，分别对应(c) 情况3和(d) 案例4。

此外，由于当前VPM最初是为处理诺伊曼边界条件而提出的，因此这里以案例4为例分析界面处的标量通量。图14绘出了界面$x = 0.1, y = 0$附近模拟标量通量的时间演化，即固体侧的标量通量q_s、流体侧的标量通量q_f以及界面处的通量跳跃q_w。它们分别定义如下，

$$q_s^{\mathrm{VPM}} = -D_s \left.\frac{\partial c^{\mathrm{VPM}}}{\partial n}\right|_{\phi_0=\delta}, \tag{43}$$

$$q_s^{\mathrm{BFM}} = -D_s \left.\frac{\partial c_s^{\mathrm{BFM}}}{\partial n}\right|_{\phi_0=0^+}, \tag{44}$$

$$q_s^{\mathrm{VPM}} = -D_s \left.\frac{\partial c^{\mathrm{VPM}}}{\partial n}\right|_{\phi_0=\delta}, \tag{45}$$

$$q_f^{\mathrm{BFM}} = -D_f \left.\frac{\partial c_f^{\mathrm{BFM}}}{\partial n}\right|_{\phi_0=0^-}, \tag{46}$$

$$q_w^{\mathrm{VPM}} = q_f^{\mathrm{VPM}} - q_s^{\mathrm{VPM}} = -D_f \left.\frac{\partial c^{\mathrm{VPM}}}{\partial n}\right|_{\phi_0=-\delta} + D_s \left.\frac{\partial c^{\mathrm{VPM}}}{\partial n}\right|_{\phi_0=\delta}, \tag{47}$$

$$q_w^{\mathrm{BFM}} = q_f^{\mathrm{BFM}} - q_s^{\mathrm{BFM}} = -D_f \left.\frac{\partial c_f^{\mathrm{BFM}}}{\partial n}\right|_{\phi_0=0^-} + D_s \left.\frac{\partial c_s^{\mathrm{BFM}}}{\partial n}\right|_{\phi_0=0^+}. \tag{48}$$

其中，$\phi_0 = \delta$ 和 $\phi_0 = -\delta$ 分别对应于界面区域（$-\delta < \phi_0 < \delta$）的固体侧和流体侧边界，如图3(a)所示。如图14所示，利用当前VPM可以准确地获得界面周围标量通量的时间演化。

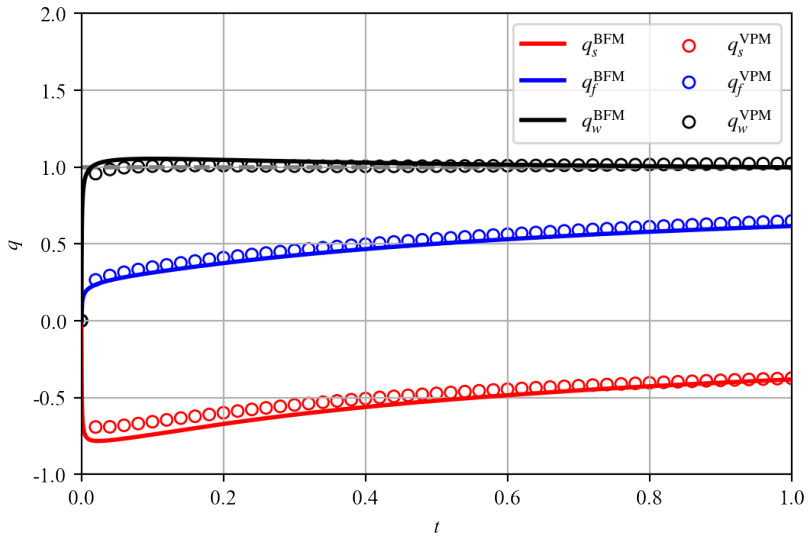


图14：案例4中固体侧标量通量、流体侧标量通量以及界面处通量跳跃的时间演化。

5. 流固耦合对流-扩散问题

5.1. 问题描述

本节将当前VPM进一步扩展至二维流固耦合对流扩散问题。如图15所示，在尺寸为 [-5、 10]×[-5、5]的计算域内，考虑半径r =0.5的圆柱周围的稳态不可压层流。坐标原点定义在圆柱中心。圆柱直径D_{cylinder} 和来流速度U_{in} 分别用作特征长度和特征速度，从而得到雷诺数$Re = \frac{U_{\mathrm{in}} D_{\mathrm{cylinder}}}{\nu} = 40$, 其中 ν 为运动黏度。当前条件对应于稳态流动状态。在流固界面处考虑恒定的标量通量跳跃q_w 。流体流动的边界条件包括：入口处速度为定值，出口处压力为定值，以及顶部和底部壁面处梯度为零。对于标量输运的边界条件，入口处给定值0.5，并在出口、顶部和底部边界施加零梯度边界条件。各相中的控制方程以及流固界面处的边界条件写为

$$
\begin{cases}
\nabla \cdot \boldsymbol{u} = 0, & \text{in } \Omega_f, \\
\boldsymbol{u} \cdot \nabla \boldsymbol{u} = -\nabla p + \dfrac{1}{Re} \nabla^2 \boldsymbol{u}, & \text{in } \Omega_f, \\
\boldsymbol{u} \cdot \nabla c_f - \dfrac{1}{ReSc} \nabla^2 c_f = 0, & \text{in } \Omega_f, \\
-\dfrac{\kappa}{ReSc} \nabla^2 c_s = 0, & \text{in } \Omega_s,
\end{cases} \tag{49}
$$

$$
\begin{cases}
c_f = \alpha_s c_s, \\
-\dfrac{\kappa}{ReSc} \left. \dfrac{\partial c}{\partial n} \right|_s + q_w = -\dfrac{1}{ReSc} \left. \dfrac{\partial c}{\partial n} \right|_f, & \text{on } \partial\Omega_{fs},
\end{cases} \tag{50}
$$

其中，施密特数定义为$Sc = \frac{\nu}{D_f}$，$\kappa = \frac{D_s}{D_f}$为固体与流体之间的分子扩散率之比。流体相和固体相的统一VPM控制方程为

$$
\begin{cases}
\nabla \cdot \boldsymbol{u} = 0, \\
\boldsymbol{u} \cdot \nabla \boldsymbol{u} = -\nabla p + \dfrac{1}{\mathrm{Re}} \nabla^2 \boldsymbol{u} - \eta\, \phi\, \boldsymbol{u}, \\
\boldsymbol{u} \cdot \nabla h = \dfrac{1}{\mathrm{Re\,Sc}} \nabla \cdot (D \nabla h) + \nabla \cdot \left(q_w^* \, \phi \, \boldsymbol{n} \right),
\end{cases} \tag{51}
$$

其中

$$
D(\phi_0) = \begin{cases} 1, & \phi_0 < 0, \\ \kappa, & \phi_0 \geq 0. \end{cases} \tag{52}
$$

在当前算例中，常数参数设置为 $Re = 40$、$Sc = 0.5$, $\kappa = 5$, $\alpha_s = 1.25$，以及 $q_w = 100.0$。

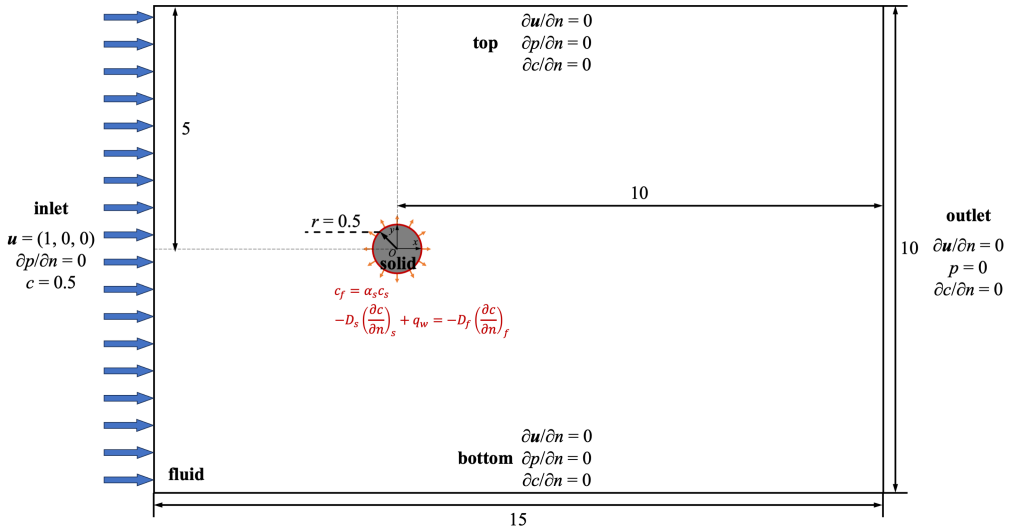


图 15：流固耦合对流-扩散问题示意图。此处，白色和灰色区域分别表示流体相和固体相，红色圆圈表示流固界面。橙色箭头表示界面上恒定标量通量的均匀分布 q_w 。

与第 4 节中的流固耦合标量扩散问题类似，当前VPM采用网格尺寸为 0.005 的笛卡尔网格。随后，将 VPM 的结果与通过 OpenFOAM 中的 chtMultiRegionFoam 模拟得到的 BFM 结果进行比较。图 16 展示了笛卡尔网格和贴体网格的分布。

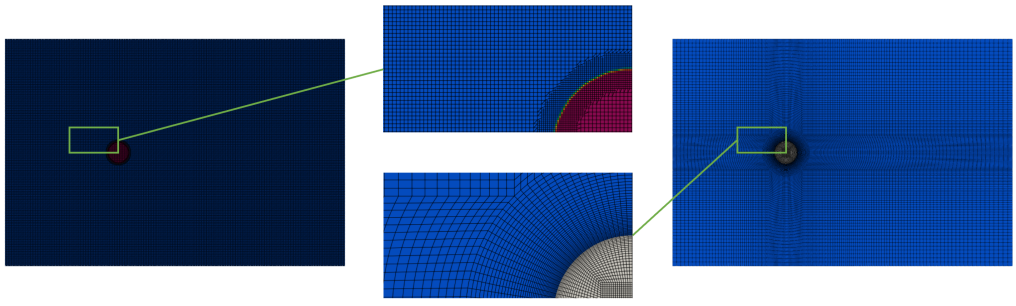
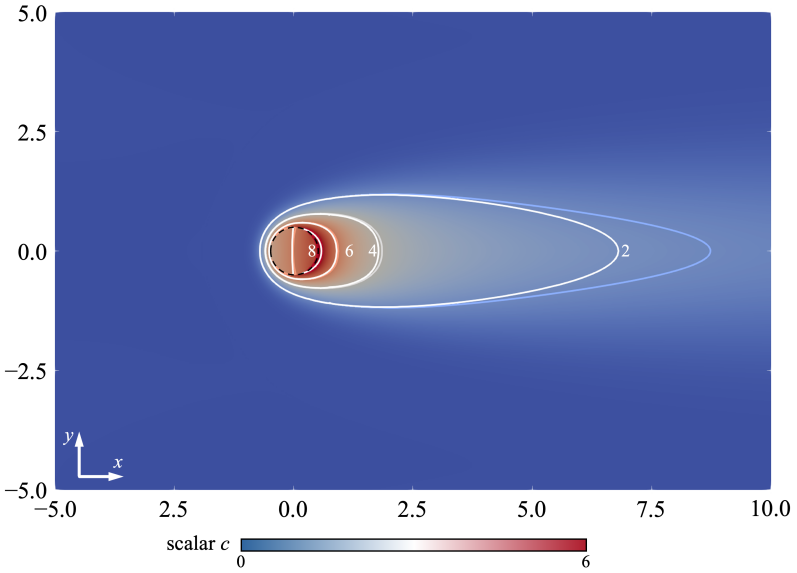


图 16：流固耦合对流-扩散问题中笛卡尔网格（左）和贴体网格（右）的网格分布。

5.2. 结果与讨论

图17展示了由当前VPM和BFM求解器获得的稳态标量等值线及其沿直线 $y = 0$ 的分布。通过比较可以确认，当前VPM的结果与采用贴体网格获得的结果吻合良好。当前方法能够准确再现界面附近标量及其通量的界面跃变。VPM与BFM结果的定量比较表明，根据公式42定义的相对偏差为1.59%。该结果验证了当前VPM同样适用于具有界面跃变条件的对流-扩散共轭传输问题。

(a)



(b)

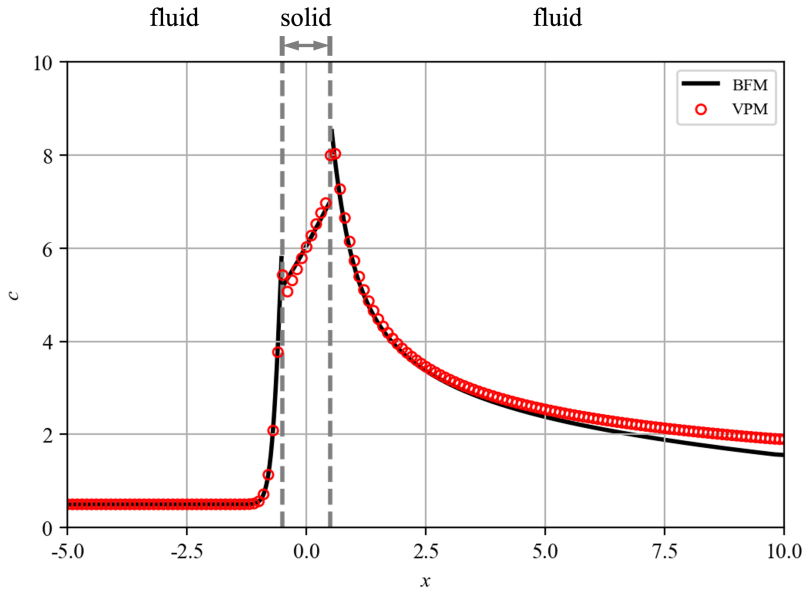


图17：稳态标量的分布：（a）区域内部和（b）沿$y = 0$线。在图17(a)中，彩色等值线表示 VPM 结果，白色等值线表示 BFM 结果。黑色虚线圆表示流固界面。

6. 结论

体积惩罚方法是一种弥散浸入边界法，已广泛用于具有复杂几何的流动和传热数值模拟，以避免繁琐的网格生成。尽管该方法在实现狄里克雷边界条件方面取得了巨大成功，但将其应用于诺伊曼边界条件的尝试仍然有限。在传统的 VPM 中，标量在流体区域内被强制使其导数达到目标值，同时人工标量场也会在固体内部扩散。因此，处理耦合流体相和固体相的共轭传输问题时，通常还需要额外的步骤。

本研究提出并验证了一种用于求解具有界面跃变条件的共轭标量输运问题的 VPM。首先，提出了一种源项具有散度形式的新型 VPM，从而利用诺伊曼边界条件建立统一的对流扩散方程。随后，通过引入等效标量和等效通量，将所提出的 VPM 进一步扩展用于求解标量及其通量发生跳跃的共轭标量输运问题。

采用一维扩散问题验证所提出 VPM 的精度。通过网格收敛性研究确认了其一阶精度，当前 VPM 与解析解之间的相对误差平均约为 1%。当前 VPM 与现有方案 [26] 的比较表明，当前方案不仅能够实现更高的模拟精度，还能避免在固体区域内产生非物理标量分布。

随后，采用当前方案模拟标量及其通量存在跃变的流固耦合扩散问题和对流扩散问题。将模拟结果与采用 BFM 得到的结果进行比较，相对偏差均在 3.0% 以内，验证了当前 VPM 处理界面跃变条件的有效性。

当前VPM的独特之处在于，流体区域和固体区域均通过求解统一控制方程进行模拟。在处理复杂几何（例如粗糙壁面 [30], 和复杂传热表面 [22]）方面，它具有显著优势。近年来，VPM方法已应用于辐射、对流和传导耦合问题 [31][32]。针对界面跳跃条件的当前VPM可以很容易地扩展到上述更复杂的正问题。此外，VPM方法还可以与伴随方法相结合，用于各种流动

和传热问题中的形状与拓扑优化，例如辐射传输 [33]，、湍流传热 [22]以及共轭传热 [32]。当前VPM在这些问题中的应用前景十分广阔，有待在未来的研究中进一步探索。

致谢

本研究部分得到了日本新能源与产业技术综合开发机构（NEDO）的国际合作创新清洁能源技术研发计划，以及日本学术振兴会的日本研究博士后奖学金（标准）——国际研究员项目的资助。Y.H. 还衷心感谢日本学术振兴会科学研究费助成事业（项目编号 JP23K26034）以及日本科学技术振兴机构（JST）通过目标导向型研发实现灵活无缝技术转移计划（A-STEP）（项目编号 JPMJTR232D）提供的支持。

利益声明

作者声明，他们不存在已知的可能影响本文所报告研究的竞争性经济利益或个人关系。

参考文献

[1] Chibouti D, Trouette B, Chenier E. 微通道中气体/固体界面处导热热流的跃变。《国际热科学杂志》，2021，159：106599。[2] Zou L, Liu Z, Zhao W, Jia H, Zheng J, Yang Y, Wang G, Zhang J, Wang C. 固液界面反应触发富镍层状正极的相变从表面向体相晶格传播。《材料化学》，2018，30，7016-7026。[3] Guo Y, Wang M. 微通道中气体流动与传热的热力学分析。《国际传热传质杂志》，2016，103：773-782。

[4] Zhang Z, Cai J, Chen F, Li H, Zhang W, Qi W. 纳米流体强化二氧化碳吸收的研究进展：机理与现状简述。《可再生能源》，2018，118：527-535。[5] Zhang L Z. Liang C H, Pei L X. 膜形成通道在所有入口区域中的共轭传热传质。《国际传热传质杂志》，2010，53：815-824。[6] Zhang L Z. 准逆流膜式全热交换器中的传热传质。《国际传热传质杂志》，2010，53：5478-5486。[7] Zhang L Z, Huang S M, Pei L X. 液体除湿剂错流中空纤维膜接触器中的共轭传热传质及空气除湿。《国际传热传质杂志》，2012，55：8061-8072。[8] Verzicco R. 浸入边界方法：历史回顾与未来展望。《流体力学年度评论》，2023，55：129-155。[9] Hu Z, Huang J, Yong W A. 具有一般界面条件的对流扩散方程格子玻尔兹曼方法。《物理评论E》，2016，93：043320。[10] Hu Z X, Huang J, Huang W X, Cui G X. 具有共轭界面条件的对流扩散方程格子玻尔兹曼方法的二阶曲面界面处理。《计算机与流体》，2017，144：60-73。[11] Huang J, Yong W A. 对流扩散方程格子玻尔兹曼方法的边界条件。《计算物理学杂志》，2015，300：70-91。[12] Mu Y T, Gu Z L, He P, Tao W Q. 具有一般界面条件的共轭传热传质格子玻尔兹曼方法。《物理评论E》，2018，98：043309。[13] Li L, Chen C, Mei R, Klausner F. 格子玻尔兹曼方程方法中的共轭传热传质。《物理评论E》，2014，89：043308。

[14] Korba D, Wang N, Li L. 格子玻尔兹曼方法中共轭传热传质界面格式的精度。《国际传热传质杂志》，2020，156：119694。[15] Kumar M, Natarajan G. 共轭传热问题的弥散界面浸入边界框架。《物理评论E》，2019，99：053304。[16] Pan D. 使用体积函数的不可压缩流浸入边界法。《国际流体数值方法杂志》，2006，50：733-750。[17] Blais B, Ilinca F. 具有自然对流的冻结与熔化稳定化浸入边界计算流体力学模型的开发与验证。《计算机与流体》，2018，172：564-581。[18] Ahn J, Song J C, Lee J S. 涉及熔化/凝固的共轭传热浸入边界法。《国际航空与空间科学杂志》，2023，24：1032-1041。[19] Schneider K, Farge M. 使用体积惩罚法对管束中瞬态流动行为的数值模拟。《流体与结构杂志》，2005，20：555-566。[20] Kadoch B, Kolomenskiy D, Angot P, Schneider K. 针对具有移动障碍物的不可压缩流和标量对流–扩散的体积惩罚法。《计算物理学杂志》，2012，231：4365-4383。[21] Kadoch B, Reimann T, Schneider K, Schafer M. 比较采用体积惩罚的谱方法与采用贴体网格的有限体积法在湍流中的表现。《计算机与流体》，2016，133：140-150。[22] Kametani Y, Fukuda Y, Osawa T, Hasegawa Y. 基于伴随优化和快速原型技术的复杂传热表面设计与验证新框架。 Journal of Thermal Science and Technology，2020，15(2)：20-00091。[23] Sakurai T, Yoshimatsu K, Okamoto N, Schneider K. 用于复杂几何中标量

通量建模的非齐次诺伊曼边界条件体积惩罚法。《计算物理学杂志》，2019，390：452-469。[24] Kolomenskiy D, Nguyen Van Yen R, Schneider K. 具有诺伊曼边界条件的体积惩罚拉普拉斯算子的分析与离散化。 应用数值数学，2015，95：238-249。[25] Thirumalaisamy R, Patankar N A, Bahlla A P S. 在虚拟区域体积惩罚框架中处理诺伊曼和罗宾边界条件。《计算物理学杂志》，2022，448：110726。[26] Brown-Dymkoski E, Kasimov N, Vasilyev O V. 适用于一般演化问题并应用于可压缩黏性流的特征线体积惩罚法。《计算物理学杂志》，2014，262：344-357。[27] Wang Y, Hou J, Li C, He Z, Zhou P, Zheng X, You S, Zhang H, Li Y, Zhang Y, Gao W. 基于数值模拟的相变蓄热罐性能分析。Applied Thermal Engineering，2023，235：121370。[28] Xu X, Di Y, Yu H. 具有广义纳维滑移边界条件的相场模型移动接触线尖锐界面极限。流体力学杂志，2018，849：805–833。[29] Domont T H B, Stoter S K F, van Brummelen E H. 纳维–斯托克斯–卡恩–希利亚德方程尖锐界面极限的数值研究。 流体力学杂志，2023，970：A24。[30] Thakker M, Busse A, Sandham N D. Nikuradse 型粗糙度替代物上湍流槽道流的直接数值模拟。 流体力学杂志，2018，387：R1。[31] Liu M, Hasegawa Y. 复杂几何中耦合辐射–导热传热问题的体积惩罚法。《国际传热传质杂志》，2023，200：123499。[32] Chen D, Hasegawa Y. 大固液热导率比共轭传热中的基于水平集的拓扑优化。 Applied Thermal Engineering，2025，279：127626。

[33] Liu M、Matsubara K、Hasegawa Y。用于体积式太阳能接收器多孔结构中辐射传输的基于伴随的形状优化。Applied Thermal Engineering，2024，246：122899。