

УДК 536.24

Прямое статистическое моделирование методом Монте-Карло дозвукового испарения в полупространство*

А.А. Морозов, Е.Я. Гатапова

Институт теплофизики им. С.С. Кутателадзе СО РАН, Новосибирск

E-mail: morozov@itp.nsc.ru

Для моделирования процессов с фазовыми переходами в тесненных условиях нужны высокоточные численные расчеты, учитывающие неравновесность процесса. В представленной работе методом Монте-Карло проведено прямое статистическое моделирование испарения в заполненное паром полупространство с формированием дозвукового течения для случая одноатомного газа. Рассматриваются два варианта постановки граничных условий в открытом полупространстве: итерационный подход с последовательным определением температуры и давления и подход с фиксированной скоростью. Проводится анализ применимости этих подходов для получения точного решения задачи. Показана более высокая точность подхода с фиксированной скоростью для малых чисел Маха. Полученные результаты сравниваются с известным решением модельного кинетического уравнения.

Ключевые слова: дозвуковое испарение, прямое статистическое моделирование Монте-Карло.

Введение

Для высокоэффективных охлаждающих устройств с микронными размерами требуются новые фундаментальные знания о процессах с фазовыми переходами на микромасштабе [1]. Испарение является одним из наиболее распространенных способов интенсификации теплообмена в тесненных условиях [2]. Однако разработка способов моделирования процесса испарения, конденсации и кипения [3] требует четкого понимания применимости различных существующих подходов для моделирования на микромасштабе, когда нужно учитывать неравновесность на межфазной границе. В современных системах охлаждения используются двухфазные течения [1], при этом реализуется дозвуковой режим течения при фазовом переходе. При испарении низкой интенсивности воды в атмосферу воздуха реализуются существенно дозвуковые течения (число Маха $M < 0,01$) с перепадом температуры на межфазной границе в доли градуса [4, 5]. Относительно фоновой температуры это соответствует изменению температуры порядка 0,1 %. Численный анализ такого слабо выраженного эффекта требует проведения прецизионных расчетов с точностью порядка 0,01 %.

* Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 20-19-00722).

Проблеме испарения в окружающее пространство посвящено много теоретических и численных работ на основе решения модельных кинетических и моментных уравнений [6–11]. В работах [2, 12] путем сравнения с результатами, полученными методами молекулярной динамики, было показано, что кинетическое S-модельное уравнение является эффективным подходом для моделирования структуры внутри и вне слоя Кнудсена. Также было установлено, что нелинейный метод моментов, примененный к уравнению Больцмана, дает результаты, хорошо согласующиеся с результатами S-модели и молекулярной динамики.

Интенсивность испарения в безразмерном виде часто связывают с числом Маха M течения пара, формирующегося от поверхности. Стационарного испарения с формированием сверхзвукового течения ($M > 1$) не существует [10], и максимальная интенсивность испарения имеет место при звуковом испарении, когда $M = 1$. При $M < 1$ реализуется дозвуковое испарение, причем при $0,5 < M < 1$ испарение обычно называют интенсивным или сильным, а при $M < 0,1$ — слабым.

Одним из наиболее точных инструментов для моделирования неравновесных течений газа традиционно считается прямое статистическое моделирование (ПСМ) методом Монте-Карло [13]. Известно, что этот метод дает результаты, хорошо согласующиеся с точным решением уравнения Больцмана [14, 15], но при значительно более высокой вычислительной эффективности. Ранее метод ПСМ достаточно ограниченно использовался для исследования дозвукового испарения жидкости в пар. В первых работах задача испарения рассматривалась в упрощенной постановке течения газа между испаряющей и поглощающей поверхностями [16, 17]. В аналогичной постановке также был проведен анализ слоя Кнудсена при звуковом испарении для бинарной смеси [18]. Фреззотти предложил модификацию метода для моделирования испарения в полупространство, при помощи которой было получено решение задачи как для многокомпонентных материалов [19], так и для многоатомных газов [20]. Позднее метод ПСМ применялся для решения близких задач по адсорбции-десорбции газа на твердых поверхностях в неравновесных условиях [21] и испарению с плоской [22, 23] и менискообразной [24] поверхностей нанопористой мембраны. Решение задачи в двухмерной постановке позволило независимо контролировать граничные условия на большом удалении от поверхности [25]. Однако в указанных работах не ставилась задача получения решения испарения в полупространство с высокой точностью при низких числах Маха.

Предлагаемая к рассмотрению задача испарения в полупространство представляет интерес как пример классического дозвукового течения. Моделирование течений с малым числом Маха методом ПСМ является сложной задачей ввиду необходимости определять малую величину скорости на фоне большого статистического шума, использования большого числа модельных частиц и трудности с постановкой корректных граничных условий. Ранее были разработаны подходы, позволяющие повысить точность вычисления скорости течения [26, 27] и уменьшить число моделируемых частиц [28]. В работах [26, 29, 30] отдельно исследовались проблемы постановки граничных условий по известным давлению или потоку для дозвуковых течений.

В настоящей работе авторы ограничиваются использованием традиционной схемы ПСМ для получения максимально точного решения задачи испарения в полупространство. Особый интерес представляет режим слабого дозвукового испарения, однако для проверки подхода рассматривается более широкий диапазон: $0,05 < M < 0,5$. Отдельное внимание уделяется постановке граничных условий в открытом пространстве, т.к. их неточность может привести к сильному искажению всего поля течения, что не позволит

корректно рассчитать скачок температуры на поверхности испарения. Используются два варианта граничных условий: итерационный подход с последовательным определением температуры и давления и подход с фиксированной скоростью на границе. Полученные результаты сравниваются с известным решением модельного кинетического уравнения.

1. Постановка задачи

Рассматривается одномерная стационарная задача испарения с плоской поверхностью в полупространство. На рис. 1 представлено схематическое изображение задачи. Задается область длиной L . На поверхности испарения ($x = 0$) задаются постоянные значения температуры T_s , плотности n_s и давления $p_s = n_s k T_s$ (здесь k — постоянная Больцмана). В предположении, что испаряющиеся частицы находятся в тепловом равновесии со стенкой, для их скоростей задается полумаксвелловская функция распределения

$$f_s(u, v, w) = \left(\frac{m}{2\pi k T_s} \right)^{3/2} \exp \left(-\frac{m(u^2 + v^2 + w^2)}{2k T_s} \right), \quad u > 0, \quad (1)$$

где u, v, w — компоненты вектора скорости частиц, m — масса молекулы. Рассматривается одноатомный газ. Для описания межмолекулярных взаимодействий используется модель твердых сфер. Предполагается, что коэффициенты испарения и конденсации равны единице, так что все возвращающиеся частицы поглощаются на поверхности испарения.

Вблизи поверхности испарения формируется так называемый слой Кнудсена, которому соответствует неравновесное состояние газа. На границе слоя Кнудсена устанавливается равновесное течение газа с температурой T_∞ , плотностью n_∞ , давлением $p_\infty = n_\infty k T_\infty$ и скоростью u_∞ . Функция распределения скоростей частиц на границе имеет вид

$$f_\infty(u, v, w) = \left(\frac{m}{2\pi k T_\infty} \right)^{3/2} \exp \left(-\frac{m((u - u_\infty)^2 + v^2 + w^2)}{2k T_\infty} \right). \quad (2)$$

Затем следует зона континуального течения, которая в общем случае характеризуется определенным градиентом параметров течения. Однако в рамках кинетического моделирования задание граничного условия с градиентом параметров представляется крайне сложной, если вообще разрешимой, задачей. С другой стороны, цель настоящего моделирования заключается в определении скачка параметров на межфазной границе, поэтому достаточно задавать на открытой границе ($x = L$) постоянные значения температуры, плотности и скорости, которые должны совпадать со значениями на границе слоя Кнудсена.

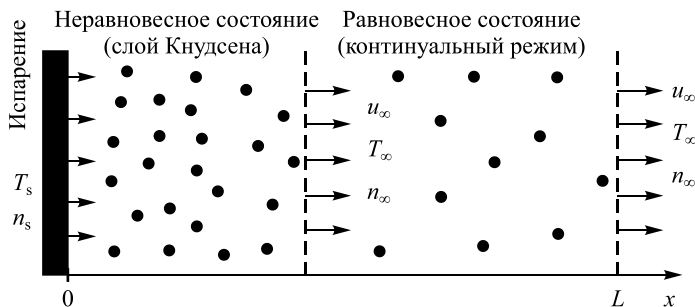


Рис. 1. Схема задачи.

Как известно, в данной постановке течение определяется только одним параметром из трех на открытой границе [7, 10]. В качестве такого параметра удобно использовать число Маха $M_\infty = u_\infty / c_\infty$, где $c_\infty = \sqrt{\gamma k T_\infty / m}$ — скорость звука, γ — показатель адиабаты (для одноатомного газа $\gamma = 5/3$).

Длина области моделирования L подбиралась таким образом, чтобы все искомые параметры гарантированно успели выйти на асимптоту. В этом случае размер области превышает размер слоя Кнудсена и получаемое решение не зависит от длины области. В расчетах эта длина менялась от $L = 12\lambda_s$ для $M_\infty = 0,05$ до $L = 40\lambda_s$ для $M_\infty = 0,5$, где $\lambda_s = 1 / (n_s \sigma \sqrt{2})$ — длина свободного пробега на поверхности испарения.

2. Метод прямого статистического моделирования Монте-Карло

2.1. Описание метода

Используется традиционная схема метода ПСМ [13]. Область разделена на вычислительные ячейки с одинаковым размером Δx . В начальный момент времени она заполняется большим количеством модельных частиц с плотностью $n'_\infty = p'_\infty / (k T'_\infty)$ и равновесной функцией распределения скоростей (2) с температурой T'_∞ и скоростью $u'_\infty = M_\infty c'_\infty$. Здесь T'_∞ и p'_∞ — некоторые гипотетические значения температуры и давления на открытой границе для заданного числа Маха M_∞ , которые можно задать равными значениям и на поверхности испарения или использовать величины, приведенные, например, в работах [8, 9]. Решение находится путем отслеживания во времени этих модельных частиц. Каждая модельная частица представляет собой F_N реальных молекул, ее состояние определяется положением в пространстве (координата x) и вектором скорости $\mathbf{v}$. Процесс моделирования разделен на две части: сначала моделируется бесстолкновительное перемещение частиц в пространстве, а затем — столкновения между частицами. Столкновение между частицами моделируется в соответствии со схемой без счетчика времени (англ. no time-counter) [13]. Количество пар частиц, выбранных для столкновений в ячейке за временной шаг Δt , рассчитывается как

$$N_{\text{col}} = \frac{N_C(N_C - 1)F_N\sigma c_{r,\text{max}}\Delta t}{2\Delta x}, \quad (3)$$

где N_C — число частиц в ячейке, σ — полное сечение столкновений, $c_{r,\text{max}}$ — максимальная относительная скорость двух частиц. Для каждой пары частиц вычисляется относительная скорость $c_r = |\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2|$ и разыгрывается случайное число $0 < R_f < 1$. Если выполняется условие $c_r / c_{r,\text{max}} > R_f$, то у выбранных частиц меняются скорости; в противном случае скорости частиц остаются неизменными. Временной шаг Δt не должен превышать среднего времени между столкновениями, а размер ячейки Δx не должен превышать длины свободного пробега $\lambda_\infty = 1 / (n_\infty \sigma \sqrt{2})$.

Считается, что до времени $10^6 t_0$ происходит начальная нестационарная стадия расчета (здесь $t_0 = \lambda_\infty / c_\infty$, где $c_\infty = \sqrt{2kT_\infty / m}$ — наиболее вероятная тепловая скорость). Только после этого начинается набор статистики для получения стационарного решения. Общая длительность расчета составляет $(2 \div 20) \cdot 10^6 t_0$.

2.2. Итерационный подход

Для постановки граничных условий в открытом пространстве применяются два различных подхода. В первом подходе используется прямое решение задачи с итерационным подбором граничных условий на открытой границе. Как было указано выше, в первом расчете для заданного числа Маха M_∞ задаются гипотетические значения температуры T'_∞ и давления p'_∞ . Полученные профили температуры и давления характеризуются зоной сильного падения вблизи поверхности испарения с последующим выходом на постоянные значения T''_∞ и p''_∞ . Эти новые значения T''_∞ и p''_∞ используются в качестве граничных условий для следующего расчета. Так продолжается до тех пор, пока отличие между T''_∞ и p''_∞ от T'_∞ и p'_∞ не становится меньше 0,0001. Тогда T''_∞ и p''_∞ отождествляются с искомыми значениями T_∞ и p_∞ . Данный подход является наиболее простым в постановке и обычно применяется при решении рассматриваемой задачи на основе модельного кинетического уравнения [2, 12].

2.3. Подход с фиксированной скоростью

Второй подход основан на использовании свойства симметрии функции распределения скоростей на открытой границе [19, 20]. Предполагается, что функция распределения вектора скорости $\mathbf{v} = (u, v, w)$ в направлении x на открытой границе симметрична относительно скорости u_∞ . Это означает, что для компоненты скорости u выполняется условие

$$f(u) = f(u^*), \quad \text{где } u^* = 2u_\infty - u. \quad (4)$$

Данное граничное условие может быть преобразовано в простой алгоритм изменения скоростей частиц при пересечении границы области расчета. Когда частица пересекает плоскость $x = L$, ее компонента скорости u меняется на u^* в соответствии с уравнением (4). Если $u^* < 0$, то частица запускается обратно в область расчета с вероятностью

$$p = |u^*|/u. \quad (5)$$

Эта вероятность может быть выведена с учетом того, что поток частиц, вылетающих из области расчета, задается выражением $\Psi^+ = uf(u)$, тогда как поток частиц, влетающих в область, определяется как $\Psi^- = u^*f(u^*)$. Отношение этих потоков $|\Psi^-|/\Psi^+$ равняется p и не зависит от формы функции распределения f .

Описанный подход позволяет сразу получить решение при заданной скорости на открытой границе. Если же необходимо получить решение с заданной температурой или числом Маха, то необходимо, как и в первом случае, провести несколько итераций с последовательным уточнением параметров на границе. При этом, например, для заданного числа Маха M_∞ в первом расчете надо задать предполагаемые значения температуры T'_∞ и давления p'_∞ , на основе которых определяется скорость $u'_\infty = M_\infty c'_\infty$. Поскольку на открытой границе установлены так называемые «мягкие» условия (температура и давление не зафиксированы), то в процессе расчета вблизи открытой границы формируется течение с новыми значениями T''_∞ и p''_∞ . Значение T''_∞ используется для определения скорости $u''_\infty = M_\infty c''_\infty$ в новом расчете.

3. Результаты расчетов

3.1. Влияние числа модельных частиц на решение

Рассматриваемая задача характеризуется большими требованиями к числу модельных частиц. В качестве критерия используется число модельных частиц на одной длине

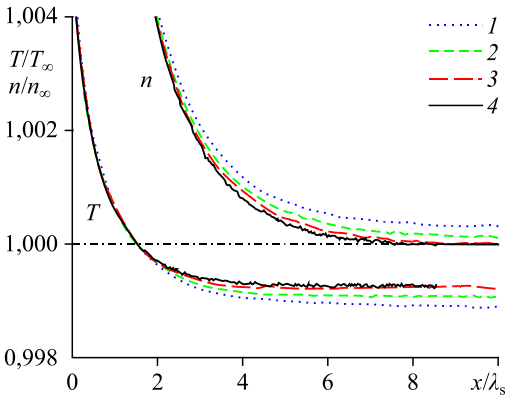


Рис. 2. Профили плотности и температуры для числа Маха $M_\infty = 0,1$, полученные при помощи подхода с фиксированной скоростью для числа модельных частиц $N_\lambda = 500$ (1), 1000 (2), 2000 (3), 4000 (4) для $T_\infty/T_s = 0,9599$ и $p_\infty/p_s = 0,8267$.

свободного пробега $N_\lambda = N_C \lambda_\infty / \Delta x$ [31].

На рис. 2 показаны профили плотности и температуры для $N_\lambda = 500, 1000, 2000, 4000$, полученные с помощью подхода с фиксированной скоростью. На границе задаются значения $T_\infty/T_s = 0,9599$ и $p_\infty/p_s =$

$= 0,8267$, полученные при решении данной задачи на основе модельного кинетического уравнения [8]. Видно, что только при $N_\lambda \geq 2000$ результаты практически перестают изменяться, поэтому во всех расчетах использовалось $N_\lambda = 2000$. Изменение размера ячейки Δx в диапазоне от $0,025\lambda_\infty$ до $0,5\lambda_\infty$ при фиксированном $N_\lambda = 2000$ показало более слабое влияние на результаты. Оптимальный размер ячейки, не искажающий результаты расчета, был определен как $\Delta x = 0,1\lambda_\infty$. Временной шаг задавался соответственно равным $\Delta t = 0,1t_0$. Отметим, что для параметров расчета $N_\lambda = 2000$ и $\Delta x = 0,1\lambda_\infty$ число модельных частиц в ячейке составило $N_C = 200$, что намного превышает обычно используемые значения $N_C = 5 \div 20$ при решении более традиционных газодинамических задач [32].

Выполним оценку возможного влияния различных факторов расчета на точность получаемого решения. В представленной работе используется широко распространенный генератор случайных чисел из монографии [13], который хорошо апробирован на решении различных задач. Однако нельзя исключать, что применение другого генератора позволит улучшить точность решения. Использование максвелловской модели молекул может также улучшить точность, так как в этом случае частота столкновений не зависит от температуры. Учет отличного от единицы коэффициента испарения не должен повлиять на точность решения.

3.2. Влияние максимальной скорости влетающих частиц

При использовании итерационного подхода было установлено, что решение при малых числах Маха ($M_\infty \leq 0,1$) существенно зависит от точности моделирования скоростей молекул, влетающих в область через открытую границу. На открытой границе ($x = L$) происходит эмиссия частиц с равновесной функцией распределения (2) со скоростью u_∞ и температурой T_∞ . Для каждой испускаемой частицы компонента скорости, перпендикулярная поверхности испарения, должна находиться в диапазоне $-\infty < u < 0$. Для моделирования этого значения применяется метод исключения. Пробное значение скорости u' выбирается случайным образом в диапазоне $-u_{\max} < u' < 0$. Затем с учетом функции распределения (2) это значение скорости либо принимается (полагается $u = u'$), либо отвергается (и затем берется новое пробное значение u'). Обычно достаточно задавать $u_{\max} = 3c_\infty$. Доля частиц с компонентой скорости $|u| > |u_{\max}|$ равняется $1 - \text{erf}(3) \approx 2 \cdot 10^{-5}$, где $\text{erf}(x)$ — функция ошибок. Пренебрежение этими частицами (0,002 % от общего числа

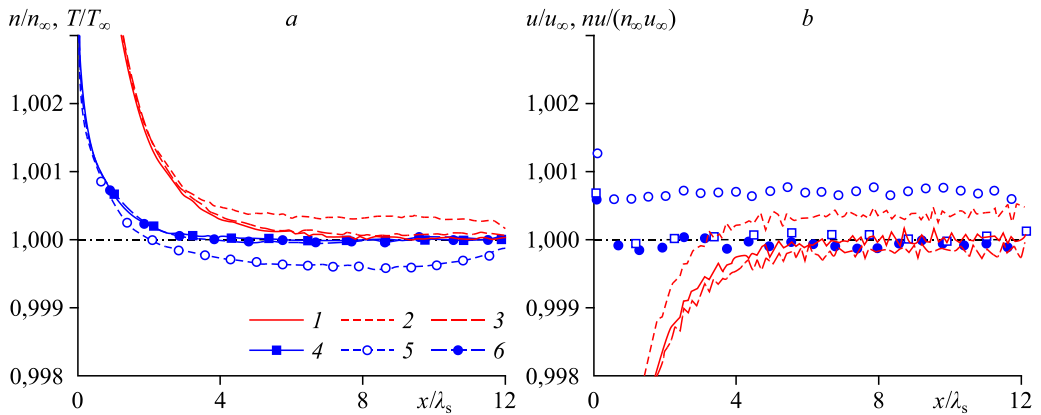


Рис. 3. Профили плотности, температуры, скорости и потока массы для числа Маха $M_\infty = 0,05$, рассчитанные с использованием разных граничных подходов с ограничением на максимальную скорость влетающих в область частиц $u_{\max} = 3c_0$ и $4c_0$ для $T_\infty/T_s = 0,97929$ и $p_\infty/p_s = 0,90791$.

a: профили плотности n (1–3) и температуры T (4–6) для фиксированной скорости (1, 4) и для итерационного подхода при $u_{\max} = 3$ (2, 5) и 4 (3, 6); *b*: профили скорости u (1–3) и потока массы ν (4–6) для фиксированной скорости (1, 4) и для итерационного подхода при $u_{\max} = 3$ (2, 5) и 4 (3, 6).

частиц) обычно мало влияет на результаты. Однако при моделировании существенно дозвуковых течений такое ограничение на максимальную скорость оказывает заметное влияние на получаемые результаты.

На рис. 3 приведены результаты расчетов для числа Маха $M_\infty = 0,05$ с ограничением максимальной скорости для влетающих молекул $u_{\max} = 3c_0$ и $4c_0$. Видно, что использование ограничения $u_{\max} = 3c_0$ приводит к заметному увеличению скорости, плотности и потока массы и соответствующему снижению температуры. Отметим, что падение температуры в газовой фазе составляет $(T(0) - T_\infty) \approx 0,0025 T_\infty$, поэтому численное отклонение 0,0005 T_∞ соответствует погрешности 20 %. Важно, что эта ошибка возникает только для итерационного подхода, так как для подхода с фиксированной скоростью скорости влетающих частиц не моделируются, а выбираются из скоростей вылетающих частиц. Отметим также, что при моделировании испарения с поверхности используется прямой способ моделирования без необходимости задавать максимальную скорость $u_{\max}$, что также исключает данную ошибку.

3.3. Анализ использования различных подходов

Рисунок 4 демонстрирует результаты различных подходов к решению рассматриваемой задачи на примере течения с числом Маха $M_\infty = 0,1$. В качестве начальных граничных условий в первой итерации используются данные $T_\infty/T_s = 0,9599$ и $p_\infty/p_s = 0,8267$, полученные при решении данной задачи на основе модельного кинетического уравнения [8]. Видно, что при применении этих граничных данных реализуется нефизический провал температуры в центральной части области расчета. Кроме того, имеет место большой скачок скорости на правой границе. Меняя путем итераций граничные значения, удалось получить более корректное решение: $T_\infty/T_s = 0,9590$ и $p_\infty/p_s = 0,8263$. Для указанного решения отличие рассчитанных значений температуры и давления на открытой границе от T_∞ и p_∞ составляет не более 0,004 %, однако все еще наблюдается большой скачок скорости (величиной в 0,1 %). Избавиться от этого скачка скорости в рамках итерационного подхода не удалось. Следует отметить, что сложности в сходимости

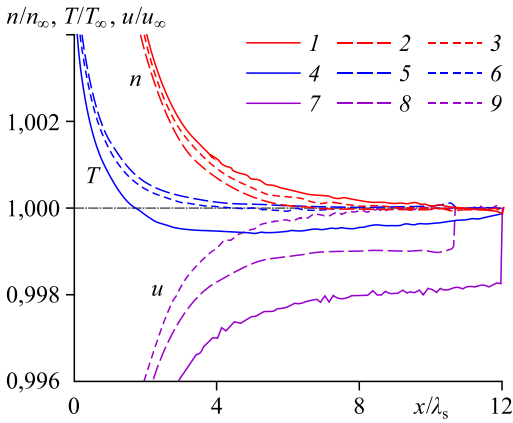


Рис. 4. Профили плотности n (1–3), температуры T (4–6) и скорости u (7–9) для числа Маха $M_\infty = 0,1$, рассчитанные с помощью итерационного подхода для $T_\infty/T_s = 0,9599$ и $p_\infty/p_s = 0,8267$ (1, 4, 7) и $T_\infty/T_s = 0,9590$ и $p_\infty/p_s = 0,8263$ (2, 5, 8) и подхода с фиксированной скоростью для $T_\infty/T_s = 0,95922$ и $p_\infty/p_s = 0,82613$ (3, 6, 9).

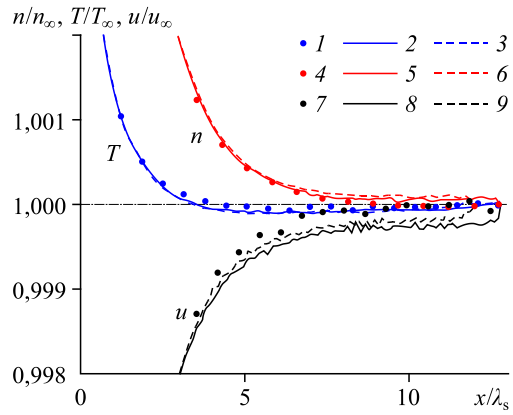


Рис. 5. Профили плотности (1–3), температуры (4–6) и скорости (7–9) для числа Маха $M_\infty = 0,1$, рассчитанные с помощью подхода с фиксированной скоростью для $T_\infty/T_s = 0,95922$ и $n_\infty/n_s = 0,86125$ (1, 4, 7) и итерационного подхода для $T_\infty/T_s = 0,95922$ и $n_\infty/n_s = 0,86125$ (2, 5, 8), 0,86122 (3, 6, 9).

при использовании итерационного подхода отмечались и другими авторами. Например, при решении аналогичной задачи на основе модельного кинетического уравнения для лучшей сходимости в работе [17] рекомендовалось фиксировать значения на открытой границе (T_∞ и p_∞) и менять значения параметров на поверхности (T_s и p_s).

Используя для расчета данного режима подход с фиксированной скоростью, авторы получили решение $T_\infty/T_s = 0,95922$ и $p_\infty/p_s = 0,82613$, которое дает перепад параметров на границе для всех характеристик в пределах 0,01 % (см. рис. 4).

Полученное решение для $M_\infty = 0,1$ оказалось очень чувствительным к граничным условиям в случае применения итерационного подхода. Расчеты показали, что рассматриваемые два подхода при использовании одинаковых значений T_∞ и p_∞ демонстрируют отличающиеся результаты, при этом точность решения с итерационным подходом может быть намного ниже точности решения с подходом с фиксированной скоростью. На рис. 5 представлены результаты расчетов с применением этих двух подходов для граничных условий, полученных подходом с фиксированной скоростью ($T_\infty/T_s = 0,95922$ и $n_\infty/n_s = 0,86125$). Для подхода с фиксированной скоростью эти граничные условия дают решение с погрешностью для всех характеристик 0,002 %, тогда как для итерационного подхода для скорости получается намного большая погрешность — 0,025 %. Это связано, по-видимому, с тем, что даже небольшая погрешность в плотности (в 0,002 %) приводит к дисбалансу потоков частиц через открытую границу и, соответственно, к уменьшению скорости на 0,025 %. Существенно снизить эту погрешность так и не удалось — даже при скорректированной плотности на границе $n_\infty/n_s = 0,86122$ (что дает скачок плотности на границе всего лишь в 0,0002 %) погрешность профиля скорости остается еще достаточно высокой и составляет 0,019 %. Следует отметить, что данный режим с $M_\infty = 0,1$ проявил себя как самый сложный для решения, и кроме того, для более высоких чисел Маха согласование между двумя подходами оказалось гораздо лучше.

3.4. Сравнение с решением модельного кинетического уравнения

Несмотря на существование множества численных работ, посвященных испарению в полупространство, пространственные профили газодинамических величин и табличные значения скачков температуры T_∞/T_s и давления p_∞/p_s для заданного числа Маха M_∞ приведены в них в незначительном количестве. Наиболее развернуто эти данные представлены в работах [8, 9] в рамках численного решения БКВ-уравнения (Больцман, Крук, Веландер). На рис. 6 приведены для сравнения профили скорости, давления и температуры, полученные методом ПСМ и решением модельного уравнения [8] для чисел Маха $M_\infty = 0,1$ и $0,5$. Видно, что имеет место заметное отличие профилей скорости и в разной степени, давления и температуры. Наибольшее отличие наблюдается в профиле температуры для $M_\infty = 0,1$ с отличием температур на открытой границе на $0,0007T_s$.

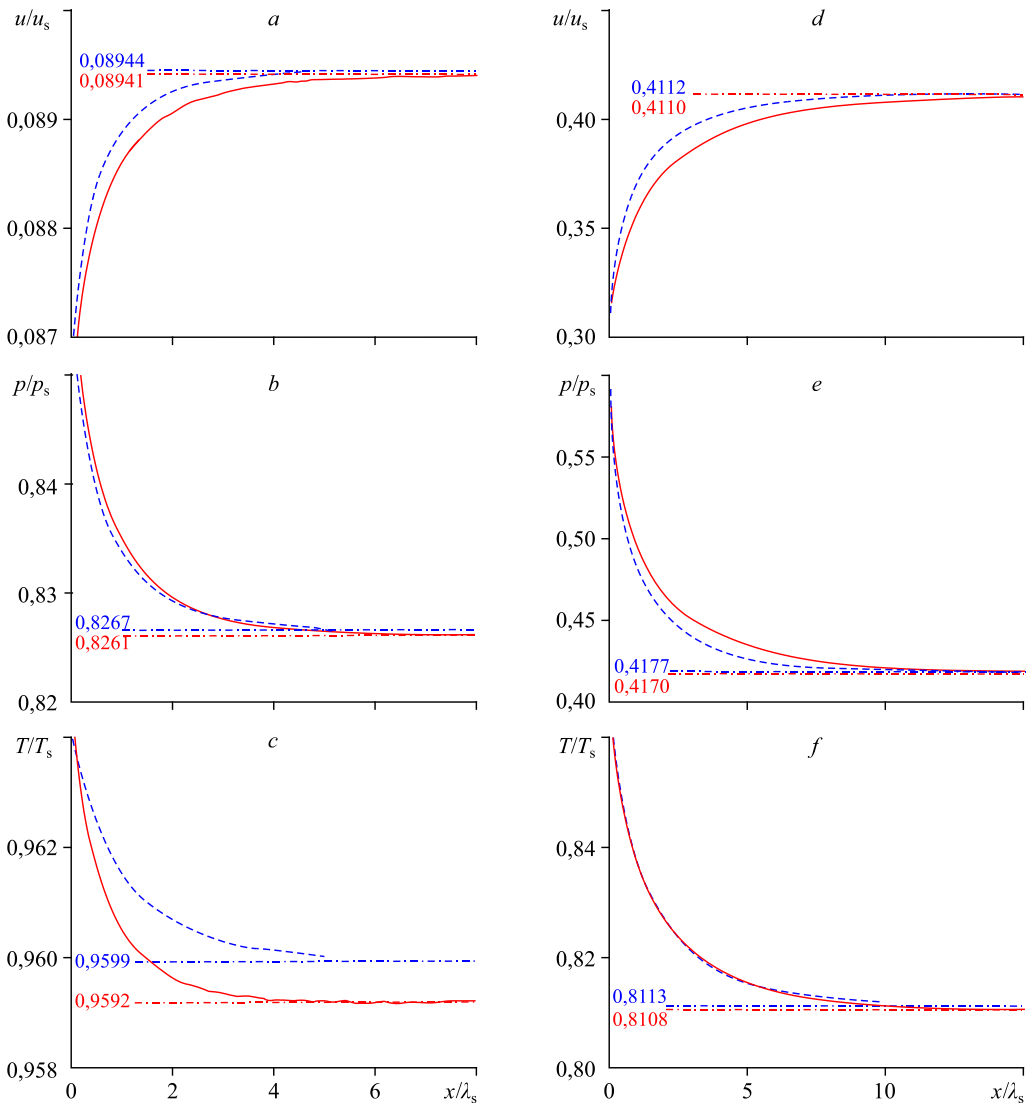


Рис. 6. Профили скорости (a, d), давления (b, e) и температуры (c, f) для чисел Маха $M_\infty = 0,1$ (a–c) и $0,5$ (d–f), полученные методом ПСМ (сплошные линии) и решения модельного кинетического уравнения [8] (пунктирные линии).

Таблица

Значения скачков давления и температуры

M_∞	p_∞/p_s			T_∞/T_s		
	ПСМ		БКВ- уравнение [8]	ПСМ		БКВ- уравнение [8]
	Итерационный подход	Подход с фиксированной скоростью		Итерационный подход	Подход с фиксированной скоростью	
0,05	0,9080	0,9079	0,9083	0,9786	0,9793	0,9798
0,1	0,8261	0,8261	0,8267	0,9586	0,9592	0,9599
0,2	0,6881	0,6883	0,6891	0,9200	0,9202	0,9212
0,5	0,4170	0,4170	0,4177	0,8108	0,8108	0,8113

на фоне общего падения температуры в газовой фазе на $0,0041T_s$, что соответствует отличию на 17 %. Эта разница может быть связана с известным численным эффектом более пологой релаксации температуры при использовании модельного уравнения по сравнению с решением методом ПСМ. Например, такой эффект возникает при моделировании ударной волны [33–35].

В таблице представлены значения скачков температуры T_∞/T_s и давления p_∞/p_s , полученные методом ПСМ с использованием двух рассматриваемых граничных подходов и при решении кинетического БКВ-уравнения [8, 9]. Видно, что итерационный подход хорошо согласуется с подходом с фиксированной скоростью при относительно высоких значениях числа Маха ($M_\infty > 0,1$), однако для $M_\infty \leq 0,1$ заметно занижает температуру — на 0,07 %. Решение кинетического уравнения дает более высокие значения как температуры, так и давления — на 0,05–0,1 %, причем наибольшее отклонение имеет место для $M_\infty = 0,2$.

В целом подход с фиксированной скоростью показал более высокую точность по сравнению с итерационным подходом. Однако даже он практически не позволяет получить решение с точностью лучше, чем 0,01 %. При попытке получить более точное решение значения T_∞ и p_∞ начинают колебаться с величиной колебаний порядка 0,001–0,005 %, что делает получение более точного решения практически невозможным ввиду необходимости проведения большого числа длительных итерационных расчетов. По этой причине в таблице значения приведены с точностью 10^{-4} , хотя обычно в расчетах значения задавались с точностью 10^{-5} . Нельзя исключать, что при моделировании испарения воды в атмосферу воздуха для существенно дозвуковых течений (с числом Маха $M_\infty < 0,01$) точность решения задачи методом ПСМ будет недостаточной для описания экспериментально наблюдаемых крайне малых скачков температуры на межфазной границе [4].

Заключение

Проведено прямое статистическое моделирование методом Монте-Карло дозвукового испарения в полупространство для одноатомного газа. Проведен анализ использования различных подходов к постановке граничных условий в открытом полупространстве. Показана существенно более высокая точность подхода с фиксированной скоростью для малых чисел Маха. Выполнено сравнение полученных результатов с результатами решения модельного кинетического уравнения и показано их заметное отличие при малых числах Маха. Результаты настоящего исследования важны для прецизионного моделирования методом Монте-Карло слабого испарения воды в атмосферу воздуха с крайне малыми скачками температуры на межфазной границе.

Список литературы

1. Bar-Cohen A., Asheghi M., Chainer T.J., Garimella S.V., Goodson K., Gorle C., Mandel R., Maurer J.J., Ohadi M., Palko J.W., Parida P.R., Peles Y., Plawsky J.L., Schultz M.D., Weibel J.A., Joshi Y. The ICECool fundamentals effort on evaporative cooling of microelectronics // IEEE Transactions on Components, Packaging and Manufacturing Technology. 2021. Vol. 11, No. 10. P. 1546–1564.
2. Graur I., Gatapova E.Y., Wolf M.C.W., Batueva M.A. Non-equilibrium evaporation: 1D benchmark problem for single gas // Intern. J. Heat Mass Transfer. 2021. Vol. 181. P. 121997–1–121997–14.
3. Актершев С.П., Мезенцева Н.Н., Мезенцев И.В. Численное моделирование роста парового пузырька в однородно перегретой жидкости (тепловая энергетическая схема) // Теплофизика и аэромеханика. 2020. Т. 27, № 1. С. 127–133.
4. Gatapova E.Ya., Graur I.A., Kabov O.A., Aniskin V.M., Filipenko M.A., Sharipov F., Tadrist L. The temperature jump at water-air interface during evaporation // Intern. J. Heat Mass Transf. 2017. Vol. 104. P. 800–812.
5. Гатапова Е.Я., Филипенко Р.А., Люлин Ю.В., Граур И.А., Марчук И.В., Кабов О.А. Экспериментальное исследование температурного поля в двухслойной системе жидкость–газ // Теплофизика и аэромеханика. 2015. Т. 22, № 6. С. 729–734.
6. Schrage A. A theoretical study of interphase mass transfer. New York: Columbia University Press, 1953. 103 p.
7. Ytrehus T. Molecular flow effects in evaporation and condensation at interfaces // Multiphase Sci. Technology. 1997. Vol. 9. P. 205–327.
8. Sone Y., Sugimoto H. Strong evaporation from a plane condensed phase / Eds. G.E.A. Meier, P.A. Thompson // Adiabatic Waves in Liquid-Vapor Systems. Springer: New York, 1990. P. 293–304.
9. Sone Y. Kinetic theoretical studies of the half-space problem of evaporation and condensation // Transport Theory and Statistical. Phys. 2000. Vol. 29, No. 3–5. P. 227–260.
10. Gusarov A.V., Smurov I. Gas-dynamic boundary conditions of evaporation and condensation: Numerical analysis of the Knudsen layer // Phys. Fluids. 2002. Vol. 14. P. 4242–4255.
11. Зудин Ю.Б. Полуэмпирическая модель интенсивного испарения // Теплофизика и аэромеханика. 2017. Т. 24, № 4. С. 539–552.
12. Graur I.A., Batueva M.A., Wolf M., Gatapova E.Y. Non-equilibrium condensation // Intern. J. Heat Mass Transf. 2022. Vol. 198. P. 123391–1–123391–15.
13. Bird G.A. Molecular gas dynamics and the direct simulation of gas flows. Clarendon Press: Oxford, 1994. 458 p.
14. Malkov E.A., Bondar Ye.A., Kokhanchik A.A., Poleshkin S.O., Ivanov M.S. High-accuracy deterministic solution of the Boltzmann equation for the shock wave structure // Shock Waves. 2015. Vol. 25. P. 387–397.
15. Morozov A.A., Frolova A.A., Titarev V.A. On different kinetic approaches for computing planar gas expansion under pulsed evaporation into vacuum // Phys. Fluids. 2020. Vol. 32. P. 112005–1–112005–9.
16. Абрамов А.А. Решение задачи о сильном испарении одноатомного газа методом Монте-Карло // Изв. АН СССР. МЖГ. 1984. № 1. С. 185–188.
17. Kogan M.N., Abramov A.A. Direct simulation of the strong evaporation and condensation problem / Ed. A. Beylich // Rarefied Gas Dynamics. VCH: Weinheim, 1991. P. 1251–1257.
18. Sibold D., Urbassek H.M. Monte-Carlo study of Knudsen layers in evaporation from elemental and binary media // Phys. Fluids A. 1993. Vol. 5, No. 1. P. 243–256.
19. Frezzotti A. Kinetic theory description of the evaporation of multi-component substances / Ed. C. Shen // Rarefied Gas Dynamics. Peking University Press: Beijing, 1997. P. 837–846.
20. Frezzotti A. A numerical investigation of the steady evaporation of a polyatomic gas // European J. of Mechanics B/Fluids. 2007. Vol. 26. P. 93–104.
21. Brancher R.D., Stefanov S., Graur I., Frezzotti A. A kinetic model for gas adsorption-desorption at solid surfaces under non-equilibrium conditions // Vacuum. 2020. Vol. 174. P. 109166–1–109166–12.
22. Li R., Wang J., Xia G. Theoretical and numerical study of nanoporous evaporation with receding liquid surface: effect of Knudsen number // J. Fluid Mech. 2021. Vol. 928. P. A9–1–A9–19.
23. Wang J., Xia G., Li R. Numerical analysis of evaporation from nanopores using the direct simulation Monte-Carlo method // J. Molecular Liquids. 2022. Vol. 347. P. 118348–1–118348–11.
24. John B., Enright R., Sprittles J.E., Gibelli L., Emerson D.R., Lockerby D.A. Numerical investigation of nanoporous evaporation using direct simulation Monte-Carlo // Phys. Rev. Fluids. 2019. Vol. 4. P. 113401–1–113401–25.
25. Li R., Xia G., Wang J. Two-dimensional kinetic evaporation by direct simulation Monte-Carlo (DSMC) with independently controlled downstream boundary conditions // Intern. J. Heat Mass Transf. 2022. Vol. 194. P. 123075–1–123075–10.
26. Cai C., Boyd I.D., Fan J., Candler G.V. Direct simulation methods for low-speed microchannel flows // J. Thermophys. Heat Transfer. 2000. Vol. 14. P. 368–378.
27. Fan J., Shen C. Statistical simulation of low-speed rarefied gas flows // J. Comp. Phys. 2001. Vol. 167. P. 393–412.

28. **Stefanov S.K.** On DSMC calculations of rarefied gas flows with small number of particles in cells // *SIAM J. Sci. Comput.* 2011. Vol. 33. P. 677–702.
29. **Farbar E., Boyd I.D.** Subsonic flow boundary conditions for the direct simulation Monte-Carlo method // *Computers and Fluids*. 2014. Vol. 102. P. 99–110.
30. **Shah N., Gavasane A., Agrawal A., Bhandarkar U.** Comparison of various pressure based boundary conditions for three-dimensional subsonic DSMC simulation // *J. Fluids Engng.* 2018. Vol. 140. P. 031205-1–031205-12.
31. **Maltsev R.V.** On the selection of the number of model particles in DSMC computations // *AIP Conf. Proc.* 2011. Vol. 1333. P. 289–294.
32. **Sun Z.X., Tang Z., He Y.L., Tao W.Q.** Proper cell dimension and number of particles per cell for DSMC // *Computers and Fluids*. 2011. Vol. 50. P. 1–9.
33. **Zheng Y., Struchtrup H.** Ellipsoidal statistical Bhatnagar–Gross–Krook model with velocity-dependent collision frequency // *Phys. Fluids*. 2005. Vol. 17. P. 127103-1–127103-17.
34. **Chen S., Xu K., Cai Q.** A comparison and unification of ellipsoidal statistical and Shakhov BGK Models // *Advances. Applied. Mathematics and Mechanics*. 2015. Vol. 7. P. 245–266.
35. **Morozov A.A., Titarev V.A.** Dynamics of planar gas expansion during nanosecond laser vaporation into a low-pressure background gas // *Phys. Fluids*. 2022. Vol. 34. P. 096101-1–1096101-16.

*Статья поступила в редакцию 4 июля 2022 г.,
после доработки — 28 августа 2022 г.,
принята к публикации 2 сентября 2022 г.,
после дополнительной доработки — 9 апреля 2023 г.*