

Boundary Conditions for Transport Problems on the Evaporation Surface

V. Yu. Levashov¹, A. P. Kryukov^{2,1}

¹*Institute of Mechanics, Lomonosov Moscow State University, Moscow, 119192, Russia*

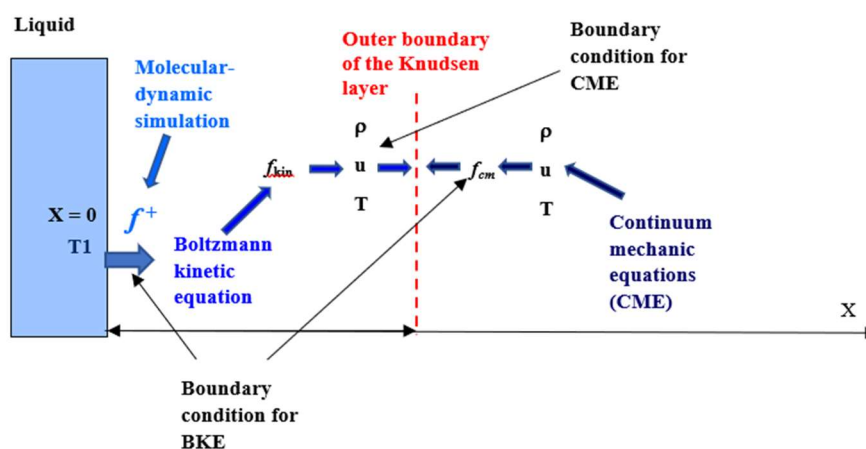
²*National Research University "MPEI", Moscow, 111250, Russia*

vyl69@mail.ru

Abstract

The peculiarities of solving evaporation problems are analyzed. Different methods of setting boundary conditions for continuum mechanics equations are studied. The results of the joint application of the continuum mechanics equations and the kinetic Boltzmann equation, as well as molecular dynamic modelling methods, in finding the velocity distribution function of molecules near the interface are presented. The distribution function of molecules moving away from the interface is determined. It is shown that the evaporation and condensation coefficients are close to unity in the problems considered.

Key words: evaporation, condensation, kinetic theory, molecular dynamics.



Scheme of boundary conditions construction in the problem with evaporation

УДК 533.7

Граничные условия для задач переноса на поверхности испарения

В. Ю. Левашов¹, А. П. Крюков^{2,1}

*НИИ Механики МГУ им. М.В. Ломоносова,
Россия, Москва, 119192, Мичуринский пр-т, д.1*

*²Национальный исследовательский университет «МЭИ»,
Россия, Москва, 111250, Красноказарменная 14*

vyl69@mail.ru

Аннотация

Анализируются особенности решения задач об испарении. Исследуются различные способы задания граничных условий для уравнений механики сплошной среды. Представлены результаты совместного применения уравнений механики сплошной среды и кинетического уравнения Больцмана, а также методов молекулярно-динамического моделирования при нахождении функции распределения молекул по скоростям вблизи межфазной поверхности. Определена функция распределения молекул, движущихся от границы раздела фаз. Показано, что коэффициенты испарения и конденсации в рассмотренных задачах близки к единице.

Ключевые слова: испарение, конденсация, кинетическая теория, молекулярная динамика.

1. Введение

Процессы испарения и конденсации широко используются в различных областях техники и наблюдаются в природных явлениях. Вероятно, именно этим фактом обусловлен неугасающий интерес к изучению таких процессов. основополагающая работа об испарении вышла более чем 140 лет назад [1]. За это время накоплен значительный опыт исследования соответствующих задач тепло-массопереноса, развиты разнообразные методы их решения, хотя и остаются не до конца решенные проблемы. Одна из них, с которой встречаются попытки описать процессы испарения методами механики сплошной среды, состоит в невозможности корректно определить скорость движения пара, образовавшегося в результате испарения и движущегося от поверхности. Традиционно эту скорость находят путем деления удельного теплового потока, подводимого к границе раздела фаз, на скрытую теплоту парообразования и равновесную плотность пара, соответствующую температуре межфазной поверхности по линии насыщения жидкости/твердое тело – пар, но такой подход не всегда оправдан по следующим соображениям. Во-первых, плотность пара вблизи границы раздела фаз при больших интенсивностях процесса может существенно отличаться от плотности насыщенного пара. Во-вторых, тепловой поток, подводимый к межфазной поверхности, может быть заранее неизвестен.

Подход, позволяющий избежать возникающих затруднений и получить необходимые граничные условия в задачах с испарением, связан с применением методов кинетической теории газов. Наиболее известным замыкающим соотношением такой теории является формула Герца – Кнудсена [1, 2]. Необходимо отметить, что ее применение может быть оправдано лишь в очень ограниченных условиях. Формула Герца – Кнудсена получена в предположении свободномолекулярного режима течения. Кроме этого, при выводе выражения Герца – Кнудсена не учитывалась скорость движения испаряющегося пара, что, как показано,

например в [3], может приводить к существенным ошибкам при расчете величины плотности потока массы. Дальнейшее развитие кинетических методов определения потока массы испаряющегося вещества для малоинтенсивных процессов представлено в статьях [4–5]. Первыми исследованиями в области интенсивного испарения можно считать работы [6, 7], если не упоминать статью P.D. Crout [8] и монографию R.W. Schrage [9]. В [10] приведено выражение для расчета величины плотности потока массы испаряющегося вещества при интенсивном испарении.

В качестве возможного метода, позволяющего «снабдить» уравнения механики сплошной среды корректными граничными условиями, предлагается использование кинетического уравнения Больцмана (КУБ) совместно с уравнениями механики сплошной среды (УМСС). При этом кинетическое уравнение Больцмана решается в узкой (10–15 длин свободного пробега молекул) неравновесной зоне вблизи межфазной поверхности, а в остальной области решение осуществляется на базе уравнений механики сплошной среды. На границах этих областей осуществляется процедура сшивания решений. Примеры использования такого рода подхода представлены в работе [11], а использование сшивного метода решения в задачах с испарением в [12, 13]. Однако, применение такого рода «сшивного» метода задач с испарением связана с определенными трудностями. Для решения кинетического уравнения Больцмана необходима информация о функции распределения молекул по скоростям, «летающих» от межфазной поверхности [14]. В общем случае эта функция состоит из двух частей – первая соответствует испарительной, а вторая – отраженной части функции распределения молекул по скоростям. Возможные способы нахождения этих функций обсуждались в работах [15–17]. Обзор и основные итоги изучения явлений переноса на границах раздела фаз пар-жидкость достаточно подробно изложены в работе [16].

В настоящей работе на примере задачи об испарении/конденсации показаны различные подходы к формулированию граничных условий для уравнений механики сплошной среды. Представлены результаты применения методов молекулярно-динамического моделирования к вычислению (нахождению) функции распределения молекул по скоростям на поверхности испарения.

2. Решение задачи об испарении/конденсации методом совместного решения кинетического уравнения Больцмана и уравнений механики сплошной среды

Рассматривается одномерная задача об испарении пара с одной поверхности и его конденсация на другой. Схема задачи представлена на рис. 1.

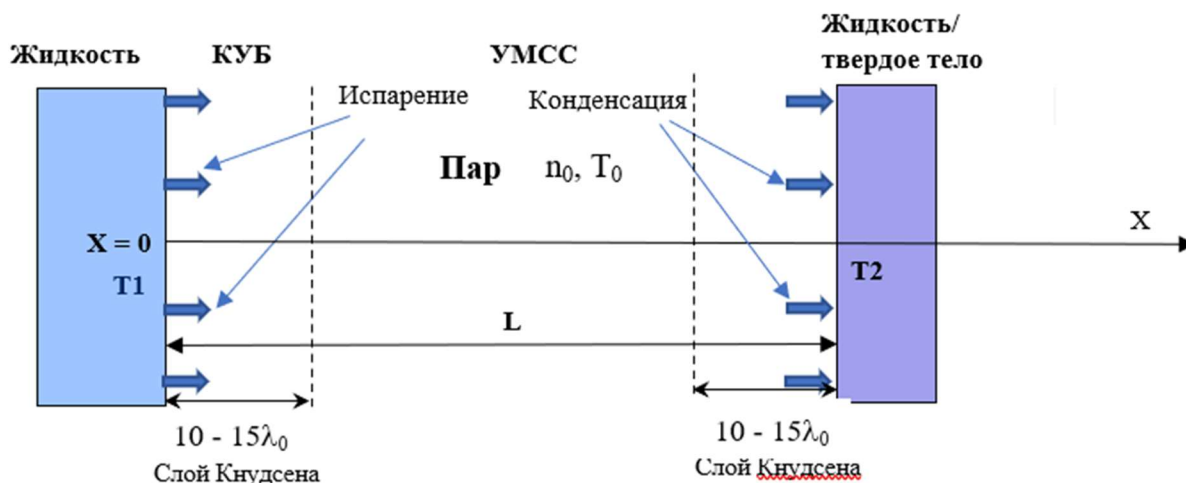


Рис. 1. Постановка задачи об испарении/конденсации

Имеется слой (пленка) жидкости с известной температурой T_1 . На некотором расстоянии L от внешней поверхности этой жидкости (координата внешней поверхности $X = 0$) находится другая поверхность (жидкость или твердое тело), температура которой равна T_2 . Между поверхностями, т.е. в области пространства $0 < X < L$ находится пар, температура – T_0 и числовая плотность которого – n_0 считаются известными в начальный момент времени. Для температур T_1 и T_2 выполняется условие: $T_1 > T_2$. В результате этого условия, наблюдается процесс испарения пара с левой поверхности, его движение через область $0 < X < L$ и последующая его конденсация на правой поверхности. Необходимо рассчитать профили макропараметров пара вдоль оси OX .

Как отмечалось выше, применение уравнений механики сплошной среды (УМСС) к задачам испарения связано с необходимостью задания корректных граничных условий для этих уравнений. Граничные условия должны быть заданы для всех зависимых переменных, причем их вид существенно зависит от конкретной рассматриваемой физической задачи. Применение кинетического уравнения Больцмана, которое для одномерной нестационарной постановки имеет следующий вид:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \xi_x \frac{\partial f}{\partial x} = J, \quad (1)$$

где $f(x, t, \xi)$ – функция распределения молекул по скоростям для пара; x – декартова координата; t – время; ξ – молекулярная скорость; J – интеграл столкновений, описывающий изменение функции распределения в результате межмолекулярных столкновений, позволяет в принципе «снабдить» уравнения механики сплошной среды необходимыми граничными условиями.

При этом нет необходимости решать данное уравнение во всей области, что является трудно реализуемым с точки зрения временных и компьютерных затрат, поскольку размер исследуемой области может существенно превышать среднюю длину свободного пробега молекулы пара – λ_0 . Необходимо лишь на базе КУБ рассмотреть характер течения газа (пара) в тонком слое (слое Кнудсена), в котором параметры пара претерпевают значительные изменения, а на границе слоя Кнудсена провести процедуру сращивания решений. На рис. 1 слой Кнудсена отстоит на расстоянии $(10 \div 15) \lambda_0$ от поверхности испарения. Схематично эту процедуру иллюстрирует рис. 2.

Процедура сращивания решений

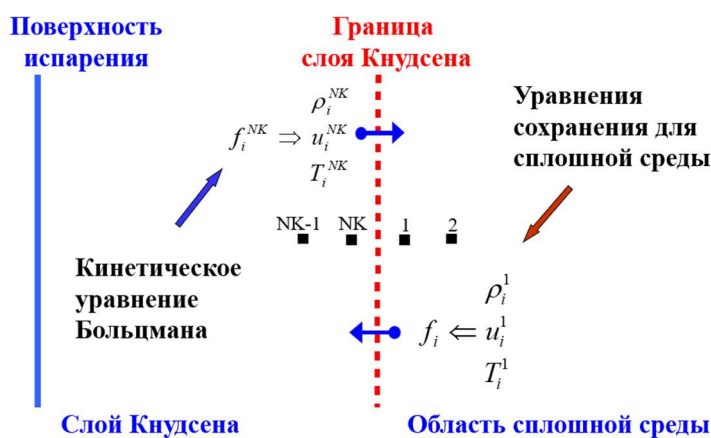


Рис. 2. Процедура сращивания решений

Параметры течения в слое Кнудсена, определяются из решения кинетического уравнения Больцмана, при этом в качестве функции распределения молекул по скоростям, «летающих» внутрь кинетической области из области сплошной среды используется функция

Чепмена – Энскога, (на рис. 2 эта функция обозначена как f_i) с параметрами из первой расчетной точки «области сплошной среды» – ρ_i^1, u_i^1, T_i^1 . Как показано в [14] именно эта функция соответствует уравнениям механики сплошной среды, которые используются для нахождения решений за пределами слоя Кнудсена (см. далее).

Из решения кинетического уравнения (1) определяется функция распределения молекул по скоростям в каждой расчетной точке слоя Кнудсена. Далее, по найденной функции производится вычисление макропараметров в этой области, в том числе определяются и макропараметры в точке НК, т.е. $\rho_{NK}, u_{NK}, p_{NK}$ и T_{NK} (см. рис. 2). После осуществления этой процедуры полученные макропараметры используют в качестве граничных условий для уравнений механики сплошной среды, которые для одномерной постановки имеют следующий вид [18]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u}{\partial x} &= 0, \\ \frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u^2) &= -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{4}{3} \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial x} \right), \\ \frac{\partial \rho e}{\partial t} + \frac{\partial \rho e u}{\partial x} &= -p \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{4}{3} \mu \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 - \frac{\partial q}{\partial x} \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь $\rho = m_0 n$ – плотность (количество вещества в единице объема); p – давление; q – поток тепла; e – внутренняя энергия; μ – коэффициент вязкости; m_0 – масса молекулы.

Результаты решения задачи об испарении/конденсации, полученные при помощи описанного выше подхода, приведены на рис. 3. Все величины представлены в безразмерной форме. В качестве базовых величин приняты параметры холодной поверхности, а для координаты – средняя длина свободного пробега, определенная по базовым плотности и температуре.

3. Молекулярно-динамический подход к построению граничных условий для кинетического уравнения Больцмана

Как отмечалось выше, для применения шивного метода решения при решении кинетического уравнения Больцмана необходима информация о функции распределения молекул по скоростям, «летающих» внутрь кинетической области. Таким образом на каждой из границ кинетической области – внешняя граница слоя Кнудсена и поверхность испарения/конденсации должны быть заданы функции распределения. Функция распределения на внешней границе слоя Кнудсена задается в виде функции Чепмена – Энскога с макропараметрами из области сплошной среды. В качестве функции распределения на межфазной поверхности (поверхностях испарения/конденсации) при получении результатов, представленных на рис. 3, функция распределения задавалась в виде полумаксвеллиана с нулевой переносной скоростью. В [19] при анализе испарения-конденсации на поверхности, отмечается: «Основное предположение во всех подходах состоит в том, что при равновесии газ, непосредственно примыкающий к межфазной поверхности, имеет то же самое распределение молекул по скоростям, как и однородный газ, удаленный от поверхности. В связи с этим, если нет отраженных молекул от поверхности жидкости, разумно предположить, что молекулы, вылетающие с межфазной поверхности, имеют максвелловское распределение по скоростям», однако, как отмечается в [19] при наличии тепломассопереноса через границу раздела фаз «Сколь-нибудь серьезный теоретический вывод такого граничного условия нам неизвестен». Очевидно, что функция распределения молекул по скоростям, летящих от поверхности конденсированной фазы, можно представить как сумму двух частей – первая описывает молекулы испарившиеся f_e , а вторая – отразившиеся f_r от межфазной поверхности [20, 21]. При этом, из всех падающих на поверхность частиц только часть – β конденсируется на этой поверхности, в то время как другая – $(1 - \beta)$ отражается.

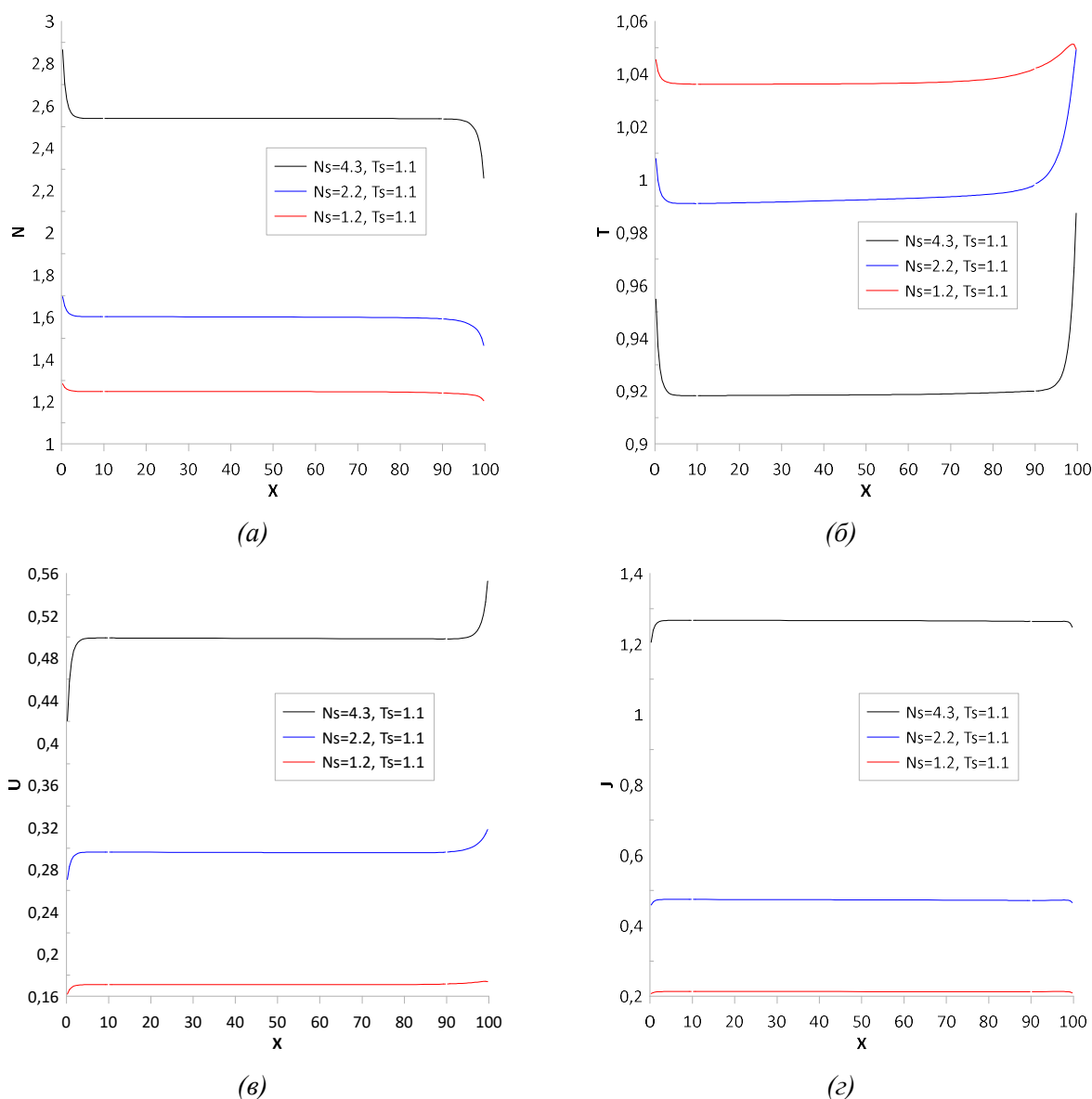


Рис. 3. Результаты решения задачи об испарении/конденсации, полученные на базе сшивного подхода для различных значений плотностей на горячей поверхности. (а) – плотность, (б) – температура, (в) – скорость, (г) – плотность потока массы

Таким образом, в общем случае функцию распределения молекул по скоростям, летящих от поверхности конденсированной фазы, можно представить как сумму двух частей – первая описывает молекулы испарившиеся f_e , а вторая – отразившиеся f_r от межфазной поверхности

$$f_+ = f_e + (1 - \beta) f_r, \quad (3)$$

где β – коэффициент конденсации, определяемый как отношение числа сконденсировавшихся на поверхности частиц к числу частиц, упавших на эту поверхность.

Таким образом нахождение (определение) функции распределения молекул пара по скоростям, «летающих» от межфазной поверхности, требует обоснования.

Один из возможных подходов, позволяющих из детальной информации о движении и взаимодействии большого числа частиц получить функцию распределения молекул по скоростям, состоит в использовании метода молекулярной динамики (МД), в котором путем решения уравнений движения для каждой частицы системы может быть определена координата и скорость каждой из них в любой момент времени.

Известны работы, в которых методами МД осуществляется расчет функции распределения молекул по скоростям, вылетающих с межфазной поверхности [22–31]. Необходимо отметить некоторые сложности использования информации об этой функции распределения, полученной методами молекулярно-динамического моделирования, в кинетических расчетах. Во-первых, хорошо известно, что при МД расчетах поверхность испарения не является четкой геометрической границей (как в молекулярно-кинетических (МКТ) расчетах). В связи с этим возникает вопрос о четком разделении области жидкости и области пара для вычисления функции распределения, а также определения температуры межфазной поверхности. Во-вторых, большинство молекулярно-динамических работ не ставят своей задачей определение функции распределения, так как полученная в результате молекулярно-динамического моделирования «избыточная» информация о координатах и скоростях каждой частицы, входящей в состав рассматриваемой системы, позволяет получить любую макроскопическую величину [32].

3.1. Испарительная часть функции распределения

Рассматривается задача об испарении в вакуум тонкого жидкого слоя. В условиях испарения в вакуум, летящие к поверхности жидкости частицы пара отсутствуют, что позволяет определять именно испарительную часть функции распределения, без учета отраженной.

Пленка жидкости моделируется системой из N частиц, расположенных в параллелепипеде с размерами $L_x \times L_y \times L_z$. Взаимодействие между частицами i и j описывается потенциалом Леннарда – Джонса

$$U(r_{ij}) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right], \quad (4)$$

где r_{ij} – расстояние между частицами; ε и σ – параметры потенциала.

Традиционно при выполнении молекулярно-динамических расчетов в качестве единицы длины выбирается диаметр молекулы – σ , в качестве единицы энергии – глубина потенциальной ямы – ε , в качестве единицы времени – $t_0 = \sigma \sqrt{m/48\varepsilon}$ и в качестве единицы температуры $T_0 = \varepsilon/k_B$. Здесь k_B – постоянная Больцмана.

Первоначально задаются начальные координаты и скорости для всех частиц, моделирующих систему. При задании начальных скоростей предполагается, что скорости частиц случайно распределены по величине и направлениям, при этом скорости нормируются таким образом, чтобы температура рассматриваемого блока, вычисленная по средней кинетической энергии молекул системы, равнялась заданной величине. Для приведения пленки жидкости к исходному равновесному состоянию с заданной температурой выполняется предварительный этап «термостабилизации» системы путем масштабирования скоростей таким образом, чтобы температура исследуемой «пленки» жидкости оставалась постоянной величиной. Периодические граничные условия используются вдоль координат x , y и z . Процесс масштабирования продолжается несколько тысяч временных шагов. По завершению этого этапа масштабирование скоростей отключается, при этом, как и ранее, используются периодические граничные условия. После завершения этого предварительного этапа имеется пленка жидкости заданной температуры. На следующем этапе границы вдоль оси z считаются открытыми, а в направлениях x и y используются периодические граничные условия. Именно с этого момента можно считать, что начинается процесс испарения. Состояние системы для момента времени $t = 1028.19t_0$ после начала процесса испарения представлено на рис. 4.

Молекулярно-динамический подход позволяет получить детальную информацию о координатах и скоростях каждой частицы, моделирующей систему, из которой представляется возможным получить величины макропараметров системы [32]. Здесь же основное внимание уделяется следующим вопросам: 1) вычисление температуры межфазной поверхности;

2) вычисление температуры пара; 3) определение функции распределения молекул пара по скоростям в различных областях пространства.

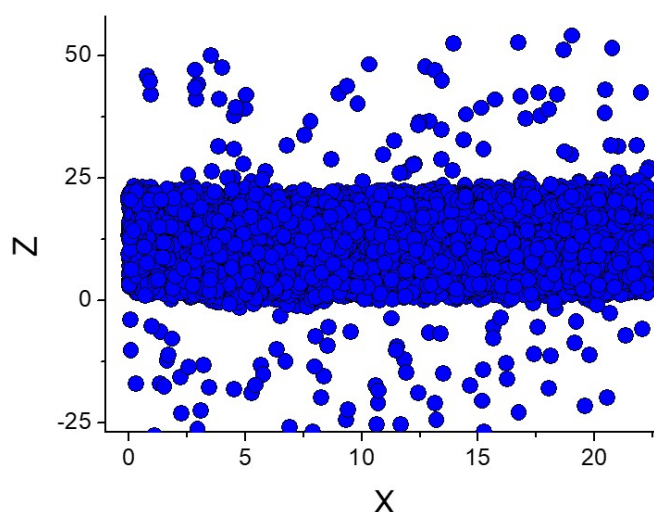


Рис. 4. Состояние системы к моменту времени $t = 1028.19t_0$

Пример профиля плотности для различных моментов времени, после начала процесса испарения, представлен на рис. 5.

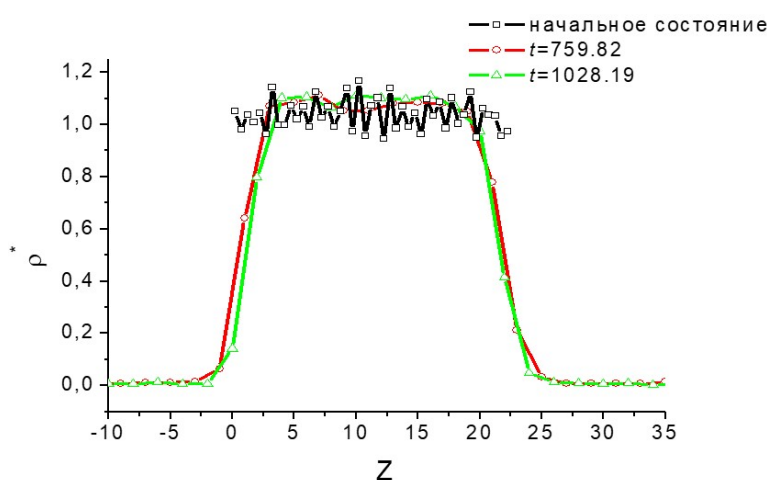


Рис. 5. Зависимости плотности системы от координаты z для различных моментов времени

Из рис. 5 видно, что часть «системы», находящуюся в интервале координат от ~ 3 до ~ 19 можно условно отнести к «жидкой» (более плотной) фазе, а части системы, находящиеся в интервале координат меньше ~ 0 и больше ~ 23 – к «газообразной» фазе. Из рисунка также хорошо видно, что существует небольшой «переходный» слой от жидкой к «газовой» фазе (области $19 < z < 23$ и $0 < z < 3$). Далее ограничимся рассмотрением параметров пара в области $z > 23$. Начальному состоянию жидкой фазы соответствует температура $T = 0.92T_0$. Температура жидкой пленки уменьшается в ходе процесса испарения, и к моменту времени $t = 1028.19t_0$ равняется $T_l = 0.85T_0$. Размер области жидкости составляет примерно 16 безразмерных единиц. В размерных величинах (для случая аргона, т.е. если $\sigma = 3.4 \times 10^{-10}$ м) эта величина равна примерно 55 \AA . Очевидно, что в этом случае температуру всего блока, вычисленную в результате МД моделирования, можно принимать за температуру межфазной поверхности.

Метод МД моделирования позволяет получить детальную информацию о координатах и скоростях частиц системы жидкость-пар. Как отмечается в [9] «такое описание движения газа является излишне полным», в кинетических расчетах используют «менее полное статистическое описание поведения системы». Одночастичная функция распределения может быть введена следующим образом:

$$Nf(\xi) = \frac{\Delta N}{\Delta \xi} \quad \text{или для } z \text{ компоненты скорости} \quad NF_z = \frac{\Delta N}{\Delta \xi_z} \quad (5)$$

Здесь $f(\xi)$ называется функцией распределения молекул по скоростям; ΔN – число частиц в интервале скоростей от $\xi - \Delta \xi$ до $\xi + \Delta \xi$.

Для реального физического пространства f – это функция семи переменных. В общем случае она зависит от времени t , трех координат x, y, z и трех компонентов вектора скорости молекул ξ_x, ξ_y, ξ_z .

Так как традиционно в кинетических вычислениях полагают, что функция распределения частиц, вылетающих с межфазной поверхности, соответствует максвелловской, то результаты МД моделирования сравниваются далее с функцией, заданной следующим выражением:

$$\frac{f}{n_s} = \left(\frac{1}{2\pi RT_s} \right)^{3/2} \exp \left[-\frac{\xi_x^2 + \xi_y^2 + (\xi_z - u)^2}{2RT_s} \right] \quad (6)$$

Для удобства графического представления результатов, далее будет использовано выражение для функции F_z , полученное из (6) интегрированием по переменным ξ_x и ξ_y , т.е.

$$F_z = \iint \frac{f}{n_s} d\xi_x d\xi_y \quad (7)$$

В результате из (6) и (7) получим

$$F_z = \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{1/2} \exp \left[-\frac{m(\xi_z - u)^2}{2k_B T} \right]$$

или, используя безразмерные переменные

$$F_z^* = \frac{F_z}{\sqrt{m/48\varepsilon}} = \left(\frac{48}{2\pi T^*} \right)^{1/2} \exp \left[-\frac{48(\xi_z^* - u^*)^2}{2T^*} \right], \quad (8)$$

где $T^* = \frac{T}{(\varepsilon/k_B)}$, $\xi_z^* = \frac{\xi_z}{\sqrt{48\varepsilon/m}}$, $u^* = \frac{u}{\sqrt{48\varepsilon/m}}$.

На рис. 6 показана функция распределения в жидкой фазе перед началом процесса испарения. Результаты, полученные путем МД моделирования, показаны на рисунке точками, штрихпунктирная линия – выражение (8) при $T = 0.92T_0$, $u = 0$.

Здесь необходимо сделать следующее замечание относительно определения функции распределения молекул по скоростям в терминах МДМ и МКТ подходов. Из решения кинетического уравнения Больцмана может быть определена функция распределения молекул по скоростям для каждой точки исследуемой области. При молекулярно-динамическом подходе, функция распределения получается в результате вычисления числа частиц с различными скоростями в определенном объеме исследуемого пространства. То есть в МД подходе, функция распределения определяется не в точке, а в конечном объеме.

Результаты расчетов функции распределения, полученные методом молекулярно-динамического моделирования, на различных расстояниях от области жидкости представлены на рисунках 7–8 (кружки).

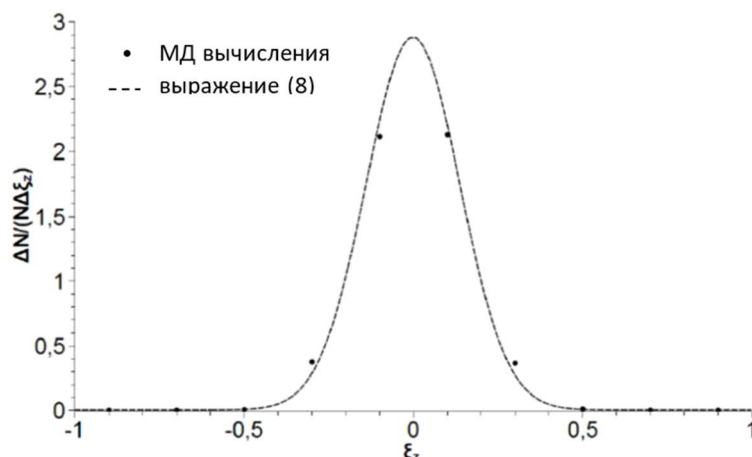


Рис. 6. Функция распределения в жидкой фазе перед началом процесса испарения

Для сравнения, на этих же рисунках представлены результаты решения задачи об испарении, полученные на базе кинетического уравнения Больцмана с функцией распределения на границе жидкости, взятой в виде полу максвелловской функцией распределения с нулевой переносной скоростью и температурой поверхности. При этом, на рис. 7 кинетическая функция распределения показана на расстоянии одной средней длины свободного пробега молекул пара от области жидкости, а результаты МД расчета получены на расстоянии 12σ (что примерно соответствует кинетическому расстоянию в одну длину свободного пробега) от области жидкости, для слоя толщиной $\Delta L_z^* \approx 25.0$. Из рисунка можно видеть, что кинетическая и МД функции распределения терпят разрыв в точке $\xi_z = 0$.

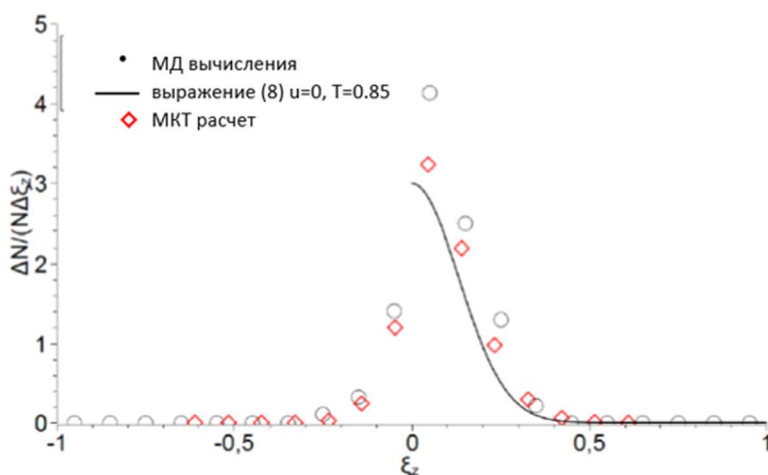


Рис. 7. «Кинетическая» и «молекулярно-динамическая» функций распределения на расстоянии 12σ от области жидкости

На всех рисунках представлены также данные по функции распределения, рассчитанные по выражению (8). При этом безразмерная температура определялась из следующего выражения

$$T = \frac{16}{N} \sum_{i=1}^N V_i^2, \quad (9)$$

где $V_i = v_i - u$, v_i – скорость частицы, u – среднemasсовая скорость.

Учитывая при вычислении только те частицы, координаты Z которых лежат в пределах от ~ 3 до ~ 19 (область жидкости), получим, что температура поверхности испарения равна $0.85T_0$. Аналогично температура газа вблизи переходного слоя равна приблизительно $0.6T_0$,

а средняя скорость $u = 0.097$. Из рис. 7 видно, что функция распределения летящих от поверхности испарения частиц близка к полумаксвелловской с температурой поверхности и нулевой переносной скоростью, а функция распределения частиц, летящих к поверхности испарения, также близка к полумаксвелловской с температурой и среднемассовой скоростью газа вблизи поверхности испарения.

На следующем рисунке (рис. 8), показана функция распределения, вычисленная вдали от поверхности испарения. «Кинетическая» функция распределения показана на расстоянии 2.5 средних длин свободного пробега молекул от поверхности испарения, а результаты МД расчета получены на расстоянии примерно 22σ от поверхности испарения, для слоя толщиной $\Delta L_z^* \approx 25.0$. Скорость и температура газа в этом слое, полученные в результате МД вычислений, равняются $u = 0.13$ и $T = 0.49T_0$.

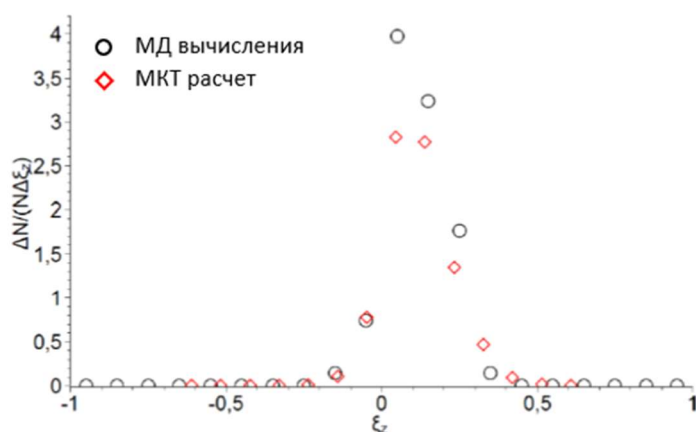


Рис. 8. Сравнение «кинетической» и «молекулярно-динамической» функций распределения на расстоянии 22σ от области жидкости

Таким образом, из удовлетворительного согласования результатов МД и МКТ расчетов можно сделать вывод о близости испарительной части функции распределения к полумаксвелловской функции с параметрами поверхности.

3.2. МД подход к вычислению коэффициента конденсации

Для определения отраженной части функции распределения, необходима информация о величине коэффициента конденсации, позволяющая определить долю сконденсировавшихся частиц из потока частиц, упавших на поверхность. Впервые в литературе понятие коэффициента испарения-конденсации, было введено, видимо, М. Кнудсенom [2], где коэффициент испарения определялся как отношение потока молекул, вылетающих из жидкости, к величине потока молекул, движущихся от границы раздела и описываемых распределением Максвелла с нулевой переносной скоростью, температурой межфазной поверхности и плотностью, соответствующей этой температуре по линии насыщения. Позже такая схема испарения была названа диффузной. Следует отметить, что существуют различные определения коэффициента конденсации. Однако, наиболее четкое (ясное) и понятное определение величины коэффициента конденсации возможно только с позиции молекулярно-кинетической теории [33].

При МД определении коэффициента конденсации, как и в задаче испарения в вакуум, пленка жидкости, моделируется системой из N частиц, расположенных в параллелепипеде с размерами $L_x \times L_y \times L_z$. Взаимодействие между частицами описывается потенциалом Леннарда – Джонса. Предварительно, как и ранее, осуществляется процесс «термостабилизации» жидкой пленки. Аналогично осуществляют подготовку скоростного распределения и «термостабилизацию» для частиц газовой фазы. При этом температура газа отличается от температуры жидкости.

В результате имеется область жидкости с заданной начальной температурой – температура жидкости и набор скоростей газовых части, соответствующий температуре газа. Величина коэффициента конденсации должна быть получена для постоянной температуры поверхности жидкости и характеризовать способность поверхности к захвату или отражению падающих на нее молекул. Из имеющегося набора газовых частиц выбирают те из них, скорости которых направлены к поверхности жидкости, т.е. в данном случае те частицы, для которых выполняется условие $V_z < 0.0$. Полагаем, что точка старта выбранной таким образом частицы находится от поверхности жидкости на расстоянии равном радиусу обрезания. Выбор такого расстояния обусловлен тем, что, именно начиная с этого расстояния, частица газа начинает «ощущать» присутствие жидкой фазы, а жидкость присутствие частицы. Как следствие, для определения параметров движения частиц (скорость, координата на каждом временном шаге) в конденсированной фазе и газовой фазе необходим учет этого влияния. Наблюдение за частицами, моделирующими рассматриваемую систему, продолжается до тех пор, пока газовая частица или не «погрузится» в жидкость или не отлетит от поверхности жидкости. Используемый метод наблюдения за каждой частицей, падающей на поверхность конденсированной фазы, позволяет отличать процесс отражение от молекулярного обмена. После завершения этого расчета из набора газовых частиц выбирается следующая частица, после чего процесс повторяется. Следует отметить, что перед началом наблюдения за каждой следующей газовой частицей поверхность жидкости приводится в первоначальное состояние. Таким образом, каждый атом газа налетает на «одинаковую» поверхность жидкости и при этом взаимодействует исключительно с молекулами жидкой фазы. Примеры траекторий частиц газа с температурой 1.07, конденсирующихся на пленке жидкости, имеющей температуру 0.25, представлены на рис. 9.

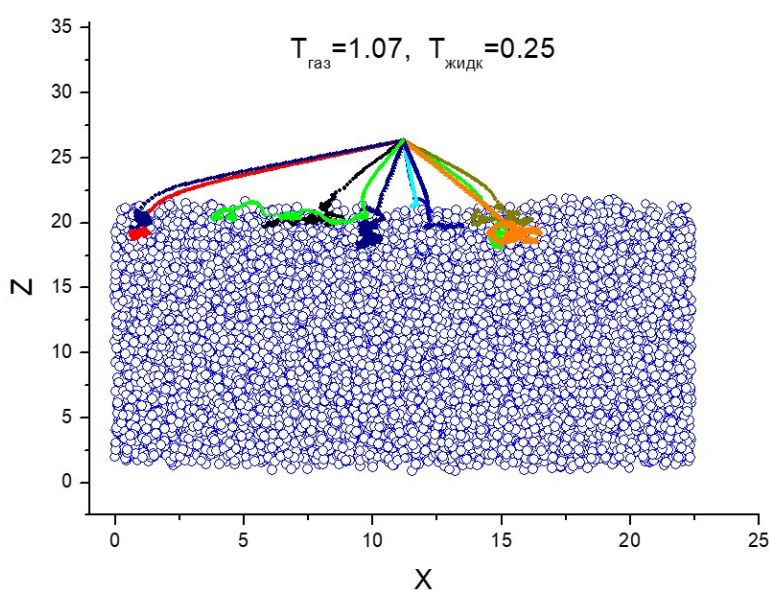


Рис. 9. Траектории частиц, взаимодействующих с поверхностью жидкости [33]

Из рисунка видно, что все указанные на рисунке атомы поглощаются поверхностью жидкости. Анализ всех набрасываемых на поверхность частиц показал, что коэффициент конденсации для данного соотношения температур составляет 0.999. Расчеты, выполненные для диапазона температур жидкости $0.25 < T_{жидк} < 0.8$, показали, что коэффициент конденсации близок к 1. Наблюдается незначительное (примерно на 8 %) уменьшение величины коэффициента конденсации при увеличении температуры жидкости в 3.2 раза [33]. Учет скорости движения пара к поверхности конденсации показывает незначительное (не более 10 %) уменьшение величины коэффициента конденсации [15].

3.3. Молекулярно-динамическое моделирование процесса испарения/конденсации

При получении представленных выше результатов предполагалось, что вычисление испарительной и отраженной части функции распределения возможно независимо друг от друга. В то же время правомерность такого рода подхода неочевидна. В этой связи, в [17] представлены результаты моделирования процесса испарения/конденсации, полученные на базе метода молекулярно-динамического моделирования задачи об испарении/конденсации. Схема задачи представлена на рис. 10.

При моделировании процесса испарения/конденсации необходимо, как показано на рис. 10, наличие двух поверхностей конденсированной фазы при разных температурах. В молекулярно-динамическом моделировании такие условия моделируются следующим образом. В центре расчетной области располагается пленка жидкости. На границах расчетной области задаются периодические граничные условия. Чтобы организовать процессы испарения с одной поверхности пленки жидкости и конденсацию пара на другой поверхности, в области жидкой пенки поддерживается постоянный градиент температуры при помощи термостата. Термостат применяется только к атомам, движущимся в серой зоне вблизи центра пленки, как показано на рис. 10. Действие термостата позволяло обеспечивать постоянство температуры холодной ($T_c = 72.3$ К) и горячей ($T_h = 80.4$ К) поверхностей в течение всего времени моделирования. На рисунке показаны профили числовой плотности числа атомов (черная линия), продольной T_x (красная линия) и поперечной T_y (синяя линия) температур взятые из результатов МД моделирования.

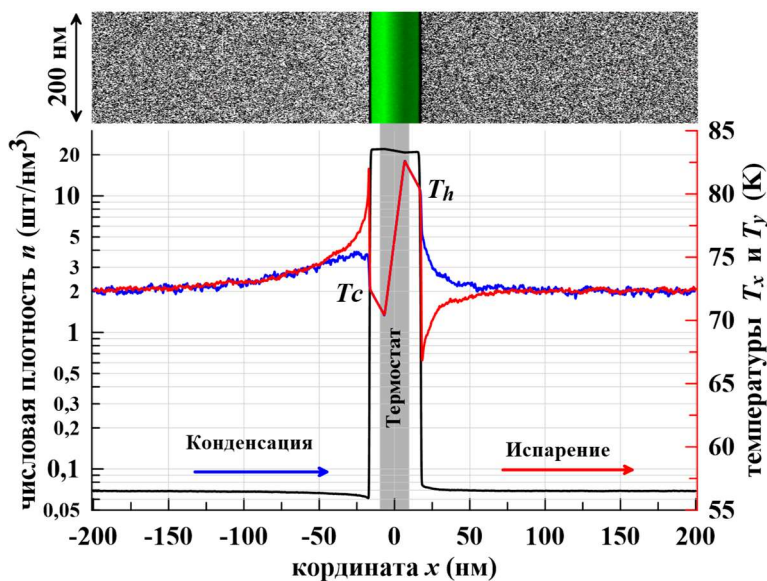


Рис. 10. Молекулярно-динамическая постановка задачи об испарении/конденсации. Показаны профили числовой плотности числа атомов (черная линия), продольной T_x (красная линия) и поперечной T_y (синяя линия) температур. Температура холодной поверхности $T_c = 72.3$ К, горячей – $T_h = 80.4$ К [17]

Результаты молекулярно-динамического моделирования сравнивались с данными, полученными путем прямого численного решения кинетического уравнения Больцмана, в аналогичных условиях для различных значений коэффициентов испарения и конденсации. Необходимо отметить, что сравнение результатов молекулярно-динамического моделирования и результатов решения, полученных из кинетического уравнения Больцмана, требует проведения предварительного согласования.

Согласование результатов необходимо по нескольким причинам. Во-первых, при решении кинетического уравнения Больцмана, использовалось сечение столкновений в виде твер-

дых упругих шаров известного диаметра. В методе молекулярно-динамического моделирования, потенциал взаимодействия – потенциал Леннард – Джонса. Как следствие, для КУБ необходимо согласование по сечению столкновения. Для этих целей предварительно решалась задача о переносе тепла. Схема задачи представлена на рис. 11.

При МД моделировании атомы на левой (горячей) и правой (холодной) зоне подвергаются воздействию двух термостатов, поддерживающих температуры 90 К и 70 К, соответственно. После достижения стационарного состояния, тепловой поток и градиент температуры измерялись в точке с координатой $x = 0$. Из данных МД моделирования была получена величина теплового потока 245 кВт/м^2 . В расчетах на базе кинетического уравнения Больцмана идентичный тепловой поток получается при выборе сечения столкновений $\sigma = 0.55 \text{ нм}$.

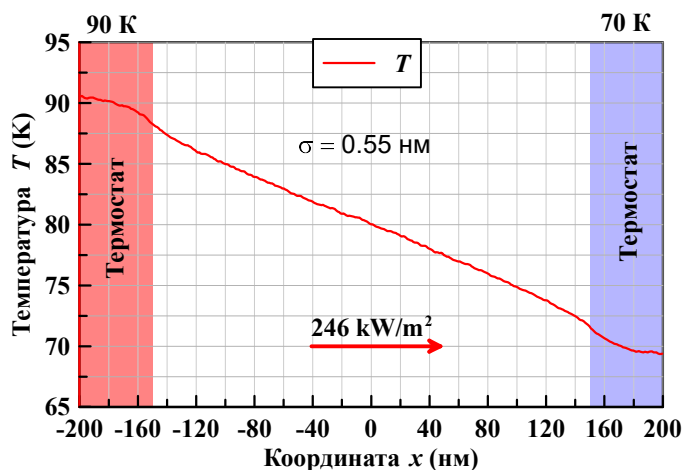


Рис. 11. Согласование решений МД и КУБ по сечению столкновений [17]

Вторая причина, требующая согласования решений, состоит в следующем. При проведении кинетических расчетов необходима зависимость давления насыщенного пара от температуры. Использование в МД расчетах потенциала Леннард – Джонса приводит к отличию этой зависимости от эмпирических данных, представленных в литературе. Таким образом, для сравнения результатов МД и МКТ расчетов необходимо использование модельной линии насыщения. Для получения необходимой зависимости в [17] проведена серия расчетов. Результаты представлены на рис. 12. Температура тройной точки модельного аргона составляет 76.7 К, что ниже экспериментальных данных (83.8 К).

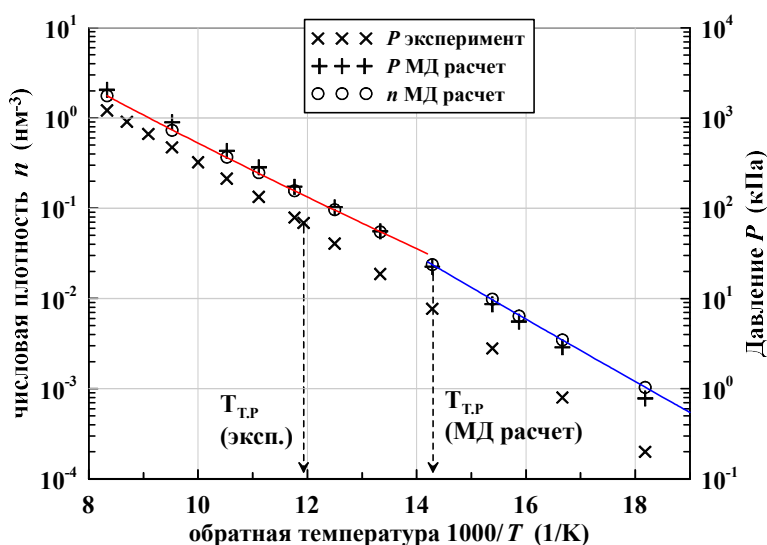


Рис. 12. Давление и плотность атомов насыщенного пара в равновесии с конденсированной фазой аргона [17]

После согласования подходов, проводились расчеты задачи об испарении/конденсации, выполненные на базе молекулярно-динамических и молекулярно-кинетических расчетов. При проведении расчетов на базе кинетического уравнения Больцмана в качестве испарительной части функции распределения использовалось полумаксвелловское распределение с температурой поверхности и плотностью, полученной из молекулярно-динамического расчета давления насыщенных паров (см. рис. 12). Коэффициент конденсации варьировался в диапазоне $0.8 \div 1.0$. Результаты сравнения задачи об испарении/конденсации по функциям распределения молекул пара вблизи горячей и холодной поверхности представлены на рис. 13.

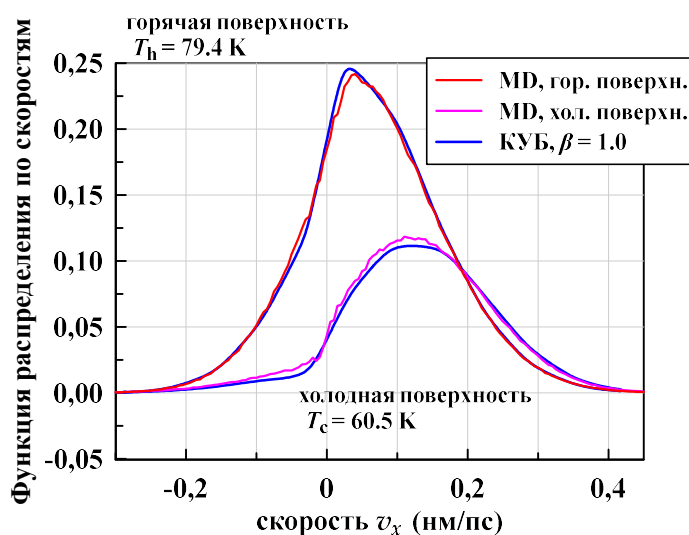


Рис. 13. Сопоставление МД и МКТ функций распределения молекул по скоростям вблизи горячей и холодной поверхностей [17]

Из сравнения видно, что функция распределения по скоростям вблизи межфазных поверхностей имеет близкую к полумаксвелловскому виду форму, а наилучшее соответствие результатов КУБ с моделированием методами МД может быть достигнуто, когда коэффициент конденсации близок к единице.

4. Заключение

Описание задач испарения и конденсации на базе уравнений механики сплошной среды связано с необходимостью формулирования корректных граничных условий, которые могут быть получены в результате использования кинетического уравнения Больцмана. В свою очередь для решения этого уравнения требуется задание функции распределения по скоростям молекул, «летающих» от межфазной поверхности.

В работе представлены подходы, базирующиеся на методе молекулярно-динамического моделирования и позволяющие получить информацию о такой функции распределения. Рассмотрены два варианта нахождения функции распределения молекул по скоростям около межфазной поверхности. Первый подход базируется на раздельном нахождении испарительной и отраженной частей функции распределения. Представлены результаты молекулярно-динамического расчета величины коэффициента конденсации. Второй вариант определения функции распределения построен на моделировании процессов в конденсированной и газовой фазе на базе единого молекулярно-динамического описания. В рамках этого подхода требуется только информация о потенциале парного взаимодействия молекул исследуемого вещества.

Проведенные расчеты показали, что функция распределения молекул, движущихся от межфазной границы, близка к полумаксвелловской функции распределения с нулевой переносной скоростью и температурой межфазной поверхности, а коэффициенты испарения и конденсации близки к единице. Интерпретация экспериментальных данных [34, 35] по отражению звука от межфазной поверхности сверхтекучего гелия подтверждает этот вывод [36].

При описании процесса испарения необходимо учитывать, что пар вблизи межфазной поверхности находится в состоянии пересыщения [10]. При численном исследовании учет влияния объемной конденсации на испарение может быть произведен различными способами [37–39].

Благодарности и ссылки на гранты

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации «Экспериментальное и теоретическое исследование кинетических процессов в газах» (номер гос. регистрации АААА-А19-119012990112-4).

Литература

1. Hertz H. *Über die Verdunstung der Flüssigkeiten, insbesondere des Quecksilbers im luftleeren Raume* // *Annalen der Physik*. 1882. Vol. 253, issue 10. Pp.177–193.
2. Knudsen M. *Die Maximale Verdampfungsgeschwindigkeit des Quecksilbers* // *Ann. Phys. und Chemie*. 1915. Bd.47. Pp. 697–708
3. Кучеров Р.Я., Рикенглаз Л.Э. О гидродинамических граничных условиях при испарении и конденсации // *ЖЭТФ*. 1959. Т. 37. Вып. 1(7). С. 125–126.
4. Лабунцов Д.А. Анализ процессов испарения и конденсации // *Теплофизика Высоких Температур*. 1967. Т. 5. № 4. С. 647–654.
5. Муратова Т.М., Лабунцов Д.А. Кинетический анализ процессов испарения и конденсации // *Теплофизика Высоких Температур*. 1969. Т. 7. № 5. С. 959–967.
6. Анисимов С.И. Испарение металла под действием лазерного излучения // *ЖЭТФ*. 1968. Т. 54. Вып. 1. С. 339–342.
7. Коган М.Н., Макашев Н.К. О роли слоя Кнудсена в теории гетерогенных реакций и в течениях с реакциями на поверхности // *Известия АН СССР. Механика жидкости и газа*. 1971, № 6.
8. Crout P.D. An application of kinetic theory to the problems of evaporation and sublimation of monatomic gases // *J. Math. Phys.* 1936. Vol. 15. Pp. 1–54.
9. Schrage R.W. *A theoretical study of interphase mass transfer*, Columbia University Press, New York, 1953.
10. Labuntsov D.A. and Kryukov A.P. Analysis of intensive evaporation and condensation // *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 1979. Vol.22. Pp. 989–1002.
11. Попов С.П., Черемисин Ф.Г. Совместное численное решение уравнений Больцмана и Навье–Стокса // *Вычислительная динамика разреженного газа*. 2000. М.: ВЦ РАН, с. 75–103.
12. Kryukov A.P., Levashov V.Yu., Shishkova I.N. Evaporation-Condensation Problem in Vapour-Gas Mixtures // *Proc. 25th Int. Symp. on RGD, Novosibirsk*. 2007. Pp.1176–1181.
13. Левашов В.Ю., Крюков А.П., Кусов А.Л. Структура течения вблизи поверхности испарения // *Изв. РАН МЖГ* (принята к публикации в 2024 г.
14. Коган М.Н. *Динамика разреженного газа*, М.: Наука. 1967. 440 с.
15. Kryukov A. P., Levashov V. Yu. Boundary conditions on the vapor liquid interface at strong condensation. // *Heat and Mass Transfer*, 52(7):1393–1401, 2016. DOI: 10.1007/s00231-015-1658-4
16. Крюков А.П., Левашов В.Ю., Жаховский В.В., Анисимов С.И. Тепло и массоперенос на межфазных поверхностях конденсат-пар. // *Успехи Физических Наук*, 2021. Т.191. № 2. С. 113–146. DOI <http://dx.doi.org/10.3367/UFNr.2020.04.038749>

17. Vasily V. Zhakhovsky, Alexei P. Kryukov, Vladimir Yu Levashov, Irina N. Shishkova, and Sergey I. Anisimov. Mass and heat transfer between evaporation and condensation surfaces: Atomistic simulation and solution of Boltzmann kinetic equation. // *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 116(37):18209–18217, 2019. DOI: 10.1073/pnas.1714503115
18. Лабунцов Д.А., Ягов В.В. Механика двухфазных систем: Учебное пособие для вузов – М.: Издательство МЭИ, 2000. 374с.
19. Rose J. W. Interphase Matter Transfer, The Condensation Coefficient and Dropwise Condensation // *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences*. Vol. 411, Issue 1841. Pp. 305–311. DOI: 10.1098/rspa.1987.0068
20. Zhakhovski V. V., Anisimov S. I. Molecular-dynamics simulation of evaporation of a liquid // *Zh. Éksp. Teor. Fiz.* 1997. Vol. 111. Pp. 1328–1346.
21. Langmuir I. Die dissoziation des wasserstoffs in atome. III. Der reaktionsmechanismus. *Zeits. Elektrochem.* 1920. 26, 197.
22. Fujikawa S., Yano T., and Watanabe M., *Vapor-Liquid Interface, Bubble and Droplets: Fundamentals and Applications*. Springer-Verlag, New York, 2011.
23. Ishiyama T., Yano T., and Fujikawa S. Molecular dynamics study of kinetic boundary condition at an interface between argon vapor and its condensed phase // *Phys. Fluids*. 2004. Vol. 16, 2899.
24. Kobayashi K., Hori K., Kon M., Sasaki K., Watanabe M. Molecular dynamics study on evaporation and reflection of monatomic molecules to construct kinetic boundary condition in vapor–liquid equilibria // *Heat Mass Transfer*. 2016. Vol. 52. Pp. 1851–185.
25. Kobayashi K., Sasaki K., Kon M., Fujii H., Watanabe M. Kinetic boundary conditions for vapor–gas binary mixture // *Microfluid Nanofluid*. 2017. Vol. 21, issue 3. DOI: 10.1007/s10404-017-1887-6
26. Zhakhovski V V, Anisimov S I Molecular-dynamics simulation of evaporation of a liquid *Zh. Éksp. // Teor. Fiz.* 1997. Vol. 111. Pp. 1328–1346.
27. Meland R., Ytrehus T. Molecular dynamics simulation of evaporation of two-component liquid // *Proceedings of 25th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics*, Editors M.S. Ivanov, A.K. Rebrov, Novosibirsk. 2007. Pp.1229–1232.
28. Yang T. H., Pan Chin. Molecular dynamics simulation of a thin water layer evaporation and evaporation coefficient // *Int. J Heat and Mass Transfer*. 2005. Vol. 48. Pp. 3516–3526.
29. Tsuruta Takaharu, Gyoko Nagayama. A microscopic formulation of condensation coefficient and interface transport phenomena // *Energy*. 2005. Vol. 30, issue 6. Pp. 795–805
<https://doi.org/10.1016/j.energy.2004.04.011>
30. Tokunaga A., Nagayama G., Tsuruta T. A study on inverted temperature profile base on nonequilibrium molecular dynamics simulation // *Proceedings of the 14th International Heat Transfer Conference IHTC14*, August 8-13, 2010, Washington, DC, USA.
31. Matsumoto M. Molecular dynamics simulation of interphase transport at liquid surfaces // *Fluid Phase Equilibria*. 1996, Vol. 125. Issue 1–2. Pp. 195–203. [https://doi.org/10.1016/S0378-3812\(96\)03123-8](https://doi.org/10.1016/S0378-3812(96)03123-8)
32. Rapaport D. C. *The art of molecular dynamics simulation*. Second Edition. Cambridge University Press, 2004.
33. Крюков А. П., Левашов В. Ю., Павлюкевич Н. В. Коэффициент конденсации: определения, современные экспериментальные и расчетные данные, оценка величины // *Инженерно-физический журнал*. 2014. Т. 87, № 1. С. 229–237.
34. Furukawa T., Murakami M., *Transient Evaporation Phenomena Induced by Impingement of Second Sound on a Superfluid Helium-Vapor Interphase*, In *Rarefied Gas Dynamics*, edited by Brun R., Campargue R., Catignol R., Lengrand J.L. Cepadues-Editions, Toulouse, France. 1999. Vol.1. Pp. 519–526.
35. Maki M., Furukawa T. and Murakami M., *Experimental Study of Condensation Coefficient and Slip Boundary Condition in He II Evaporation* // *Book of Abstracts, 22nd International Symposium on Rarefied gas dynamics*, 9-14 July, 2000, Sydney, Australia / editors: Timothy J. Bartel, Michael A. Gallis.

36. Kryukov A. P., Levashov V. Yu., About evaporation–condensation coefficients on the vapor–liquid interface of high thermal conductivity matters // *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 2011. Vol. 54. Pp. 3042–3048.
37. Левашов В. Ю., Майоров В. О., Крюков А. П. Изменение величины испарительного потока в результате объемной конденсации пара вблизи межфазной поверхности // *ПЖТФ*. 2023. Т. 49. № 10. С. 9–12. DOI: 10.21883/PJTF.2023.10.55426.19532
38. Корценштейн Н. М., Петров Л. В., Рудов А. В., Ястребов А. К. Численное моделирование объемной конденсации пара вблизи межфазной поверхности при интенсивном испарении // *Физико-химическая кинетика в газовой динамике*. 2023. Т. 24, вып. 5. <http://chemphys.edu.ru/issues/2023-24-5/articles/1076/>
39. Назаров В. С. Приложение моментного метода для моделирования гетерогенной конденсации и испарения // *Физико-химическая кинетика в газовой динамике*. 2021. Т. 22, вып. 5. <http://chemphys.edu.ru/issues/2021-22-5/articles/949/>

References

1. Hertz H., Uber die Verdunstung der Flussigkeiten, insbesondere des Quecksilbers im lufteeren Raume, *Annalen der Physik*, 1882, vol. 253, issue 10, pp.177–193. DOI: 10.1002/andp.18822531002
2. Knudsen M., Die Maximale Verdampfungsgeschwindigkeit des Quecksilbers, *Annalen der Physik*, 1915, vol. 352, issue 13, pp. 697–708. DOI: 10.1002/andp.19153521306
3. Kucherov R. Ya. , Rikenglaz L. E., Slipping and Temperature Discontinuity at the Boundary of a Gas Mixture, *JETP*, 1959, vol. 9, no. 6, p. 1253.
4. Labuntsov D. A., Analysis of evaporation and condensation processes, *High Temperature*, 1967, vol. 5, no. 4, pp. 647–654 [in Russian].
5. Muratova T. M., Labuntsov D. A., Kinetic analysis of evaporation and condensation processes, *High Temperature*, 1969, vol. 7, no. 5, pp. 959–967 [in Russian].
6. Anisimov S. I., Vaporization of Metal Absorbing Laser Radiation, *JETP*, 1968, vol. 27, no. 1, p. 182.
7. Kogan M. N., Makashev N. K., On the role of the Knudsen layer in the theory of heterogeneous reactions and in currents with reactions on the surface, *Fluid Dynamics*, 1971, no. 6 [in Russian].
8. Crout P. D., An application of kinetic theory to the problems of evaporation and sublimation of monatomic gases, *J. Math. Phys.*, 1936, vol. 15, pp. 1–54.
9. Schrage R. W., *A theoretical study of interphase mass transfer*, Columbia University Press, New York, 1953.
10. Labuntsov D. A., and Kryukov A. P., Analysis of intensive evaporation and condensation, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 1979, vol. 22, pp. 989–1002.
11. Popov S. P., Cheremisin F. G., Joint numerical solution of the Boltzmann and Navier-Stokes equations, *Computational dynamics of rarefied gas*, M.: Computer Centre of the Russian Academy of Sciences, 2000, pp. 75–103 [in Russian].
12. Kryukov A. P., Levashov V. Yu., Shishkova I. N., Evaporation-Condensation Problem in Vapour-Gas Mixtures, *Proc. 25th Int. Symp. on RGD*, Novosibirsk, 2007, pp.1176–1181.
13. Levashov V. Yu., Kryukov A. P., Kusov A. L., Flow structure near the evaporation surface, *Fluid Dynamics* (accepted for publication in 2024).
14. Kogan M. N., *Rarefied gas dynamics*, M.: Nauka. 1967. 440 p. [in Russian].
15. Kryukov A. P., Levashov V. Yu., Boundary conditions on the vapor liquid interface at strong condensation, *Heat and Mass Transfer*, 2016, vol. 52, no. 7. DOI: 10.1007/s00231-015-1658-4
16. Kryukov A. P., Levashov V. Yu, Zhakhovskii V. V., Anisimov S. I., Heat and mass transfer at condensate–vapor interfaces, *Physics Uspekhi*, 2021, vol. 64, no. 2. DOI: 10.3367/UFNe.2020.04.038749

17. Zhakhovskiy V. V., Kryukov A. P., Levashov V. Yu., Shishkova I. N., and Anisimov S. I., Mass and heat transfer between evaporation and condensation surfaces: Atomistic simulation and solution of Boltzmann kinetic equation, *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 2019, vol. 116, no. 37. DOI: 10.1073/pnas.1714503115
18. Labuntsov D. A., Yagov V. V., *Mechanics of two-phase systems: Textbook for universities*, M.: MPEI Publishing House, 2000, 374 p.
19. Rose J. W., Interphase Matter Transfer, The Condensation Coefficient and Dropwise Condensation, *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences*, 1987, vol. 411, issue 1841, pp. 305–311. DOI: 10.1098/rspa.1987.0068
20. Zhakhovskiy V. V., Anisimov S. I., Molecular-dynamics simulation of evaporation of a liquid, *Zh. Éksp. Teor. Fiz.*, 1997, vol. 111, pp. 1328–1346 [in Russian].
21. Langmuir I., Die dissoziation des wasserstoffs in atome. III. Der reaktionsmechanismus, *Zeits. Elektrochem.*, 1920, vol. 26, p. 197.
22. Fujikawa S., Yano T., and Watanabe M., *Vapor-Liquid Interface, Bubble and Droplets: Fundamentals and Applications*, Springer-Verlag, New York, 2011.
23. Ishiyama T., Yano T., Fujikawa S., Molecular dynamics study of kinetic boundary condition at an interface between argon vapor and its condensed phase, *Phys. Fluids*, 2004, vol. 16, p. 2899. DOI:10.1063/1.1763936
24. Kobayashi K., Hori K., Kon M., Sasaki K., Watanabe M., Molecular dynamics study on evaporation and reflection of monatomic molecules to construct kinetic boundary condition in vapor–liquid equilibria, *Heat Mass Transfer*, 2016, vol. 52, pp. 1851–185. <https://doi.org/10.1007/s00231-015-1700-6>
25. Kobayashi K., Sasaki K., Kon M., Fujii H., Watanabe M., Kinetic boundary conditions for vapor–gas binary mixture, *Microfluid Nanofluid.*, 2017, vol. 21, issue 3. DOI: 10.1007/s10404-017-1887-6
26. Zhakhovskiy V. V., Anisimov S. I., Molecular-dynamics simulation of evaporation of a liquid, *J. Exp. Theor. Phys.*, 1997, vol. 84, pp. 734–745. <https://doi.org/10.1134/1.558192>
27. Meland R., Ytrehus T., Molecular dynamics simulation of evaporation of two-component liquid, *Proceedings of 25th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics*, Editors M. S. Ivanov, A. K. Rebrov, Novosibirsk. 2007, pp. 1229–1232 [
28. Yang T. H., Pan Chin, Molecular dynamics simulation of a thin water layer evaporation and evaporation coefficient, *Int. J Heat and Mass Transfer*, 2005, vol. 48. Pp. 3516–3526. DOI: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2005.03.015
29. Tsuruta Takaharu, Gyoko Nagayama, A microscopic formulation of condensation coefficient and interface transport phenomena, *Energy*, 2005, vol. 30, issue 6, pp. 795–805. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2004.04.011>
30. Tokunaga A., Nagayama G., Tsuruta T., A study on inverted temperature profile base on nonequilibrium molecular dynamics simulation, *Proceedings of the 14th International Heat Transfer Conference IHTC14*, August 8-13, 2010, Washington, DC, USA.
31. Matsumoto M., Molecular dynamics simulation of interphase transport at liquid surfaces, *Fluid Phase Equilibria*, 1996, vol. 125, issue 1–2, pp. 195–203. [https://doi.org/10.1016/S0378-3812\(96\)03123-8](https://doi.org/10.1016/S0378-3812(96)03123-8)
32. Rapaport D. C., *The art of molecular dynamics simulation. Second Edition*, Cambridge University Press, 2004.
33. Kryukov A. P., Levashov V. Y., Pavlyukevich N. V., Condensation coefficient: Definitions, estimations, modern experimental and calculation data, *Journal of Engineering Physics and Thermophysics*, 2014, vol. 87, no. 1, pp. 237–245. DOI: 10.1007/s10891-014-1006-4
34. Furukawa T., Murakami M., Transient Evaporation Phenomena Induced by Impingement of Second Sound on a Superfluid Helium-Vapor Interphase, *In Rarefied Gas Dynamics*, edited by Brun R., Campargue R., Catignol R., Lengrand J.L., Cepadues-Editions, Toulouse, France, 1999, vol. 1, pp. 519–526.

35. Maki M., Furukawa T., and Murakami M., Experimental Study of Condensation Coefficient and Slip Boundary Condition in He II Evaporation, *Book of Abstracts*, 22nd International Symposium on Rarefied gas dynamics, 9-14 July, 2000, Sydney, Australia / editors: Timothy J. Bartel, Michael A. Gallis.
36. Kryukov A. P., Levashov V. Yu., About evaporation–condensation coefficients on the vapor–liquid interface of high thermal conductivity matters, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2011, vol. 54, pp. 3042–3048. DOI: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2011.02.042
37. Levashov V. Yu., Mayorov V. O., and Kryukov A. P., Change in evaporation flux due to homogeneous condensation of vapour near the interfacial surface, *Technical Physics Letters*, 2023, vol. 49, issue 5, pp. 49–52. DOI: 10.21883/TPL.2023.05.56028.19532
38. Kortsenshtein N. M., Petrov L. V., Rudov A. V., Yastrebov A. K., Numerical simulation of vapor bulk condensation near the interphase surface under intensive evaporation conditions, *Physical-Chemical Kinetics in Gas Dynamics*, 2023. Vol. 24, issue 5 [in Russian]. <http://chemphys.edu.ru/issues/2023-24-5/articles/1076/>
39. Nazarov V. S. The moment method applying for modeling heterogeneous condensation and evaporation, *Physical-Chemical Kinetics in Gas Dynamics*, 2021, vol. 22, issue 5 [in Russian]. <http://chemphys.edu.ru/issues/2021-22-5/articles/949/>

Статья поступила в редакцию 7 ноября 2024 г.