



doi 10.26089/NumMet.v23r419

УДК 519.63;
536.42

Испарение и конденсация чистого пара на поверхности жидкости в методе решеточных уравнений Больцмана

А. Л. Куперштох

Институт гидродинамики имени М. А. Лаврентьева СО РАН,
Новосибирск, Российская Федерация
ORCID: 0000-0001-7980-405X, e-mail: skn@hydro.nsc.ru

А. В. Альянов

Институт гидродинамики имени М. А. Лаврентьева СО РАН,
Новосибирск, Российская Федерация
ORCID: 0000-0002-1162-3612, e-mail: aljanov-ant@yandex.ru

Аннотация: Исследованы закономерности процессов испарения и конденсации чистого пара в методе решеточных уравнений Больцмана. Выполнено моделирование этих процессов при постоянных во времени потоках пара на границе расчетной области. Показано, что в этом случае осуществляются квазистационарные режимы испарения и конденсации. Предложен простой численно эффективный метод задания потока пара на плоской границе расчетной области путем вычисления функций распределения на входящих характеристиках метода решеточных уравнений Больцмана. В расчетах показано, что поток массы при испарении плоской поверхности пропорционален разности плотностей насыщенного и окружающего пара при данной температуре поверхности, что хорошо согласуется с законом Герца–Кнудсена. Результаты трехмерного и одномерного моделирования методом решеточных уравнений Больцмана совпадают с высокой точностью. Показано, что отношение разности плотностей к потоку вещества на границе фаз при заданной температуре линейно зависит от времени релаксации как для испарения, так и для конденсации. Исследовано влияние температуры на интенсивность потоков испарения и конденсации чистого пара. Обнаружена зависимость процессов испарения и конденсации от времени релаксации, которое определяет кинематическую вязкость флюида.

Ключевые слова: метод решеточных уравнений Больцмана, фазовые переходы, динамика многофазных сред, испарение, конденсация, мезоскопические методы, компьютерное моделирование, параллельные расчеты, графические ускорители (GPU).

Благодарности: Работа выполнена в рамках Государственного задания (номер госрегистрации проекта: 1021101115389-7).

Для цитирования: Куперштох А.Л., Альянов А.В. Испарение и конденсация чистого пара на поверхности жидкости в методе решеточных уравнений Больцмана // Вычислительные методы и программирование. 2022. 23, № 4. 311–327. doi 10.26089/NumMet.v23r419.



Evaporation and condensation of pure vapor at the liquid surface in the method of lattice Boltzmann equations

Alexandr L. Kupershtokh

Lavrentyev Institute of Hydrodynamics SB RAS, Novosibirsk, Russia

ORCID: 0000-0001-7980-405X, e-mail: skn@hydro.nsc.ru

Anton V. Alyanov

Lavrentyev Institute of Hydrodynamics SB RAS, Novosibirsk, Russia

ORCID: 0000-0002-1162-3612, e-mail: aljanov-ant@yandex.ru

Abstract: The regularities of the processes of evaporation and condensation of pure steam in the method of lattice Boltzmann equations were studied. Simulation of these processes was carried out with time-stationary steam flows at the boundary of the computational domain. It is shown that quasi-stationary regimes of evaporation and condensation are realized in this case. A simple numerically efficient method was proposed for setting the steam flow on the flat boundary of the computational domain by calculating the distribution functions on the input characteristics of the lattice Boltzmann method. The calculations show that the mass flow during evaporation of a flat surface is proportional to the difference in the densities of saturated and ambient vapor at a given surface temperature that is in a good agreement with the Hertz–Knudsen law. The results of 3D and 1D modeling by the lattice Boltzmann method coincide with high accuracy. It is shown that the ratio of the density difference to the flow of matter at the phase boundary at a given temperature depends linearly on the relaxation time, both for evaporation and condensation. The effect of temperature on the intensity of evaporation and condensation flows of pure steam has been studied. The dependence of evaporation and condensation processes on the relaxation time, which determines the kinematic viscosity of the fluid, is found.

Keywords: Lattice Boltzmann equation method, phase transitions, dynamics of multiphase media, evaporation, condensation, mesoscopic methods, computer simulations, parallel computations, graphical processing units (GPU).

Acknowledgements: The research was carried out within the state assignment of Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (project No. 1021101115389-7).

For citation: A. L. Kupershtokh and A. V. Alyanov, “Evaporation and condensation of pure vapor at the liquid surface in the method of lattice Boltzmann equations,” *Numerical Methods and Programming*. 23 (4), 311–327 (2022). doi 10.26089/NumMet.v23r419.

1. Введение. Процессы испарения и конденсации являются неотъемлемой частью окружающего нас мира. Они играют важную роль во многих технологических процессах в разных отраслях науки и техники. В частности, испарение капель жидкости на нагреваемых поверхностях используется для их эффективного охлаждения [1–4]. Испарение напрямую определяет процессы кипения жидкостей при их нагреве выше температуры кипения [5–7]. Определяющую роль процесс испарения играет в механизме коллективной левитации капель над горячей поверхностью. До сих пор нет удовлетворительного описания этого процесса, при котором над поверхностью образуется устойчивый двумерный капельный кластер гексагональной структуры [8–11]. Сама левитация капель над сухой горячей поверхностью происходит из-за возникновения паровоздушного потока вследствие интенсивного испарения самих капель (эффект Лейденфроста, 1756 г.) [12]. Для понимания таких процессов необходимо их численное моделирование. Десятки работ посвящены моделированию процессов испарения и конденсации методом молекулярной динамики [13–16]. Однако выполнение расчетов этим методом возможно только для наноразмерных систем, когда количество молекул не очень большое. При теоретическом описании испарения и конденсации используется аппарат молекулярно-кинетической теории [17–19].



Хорошо известен закон испарения Герца–Кнудсена для чистого пара [17]. Поток массы при испарении с единицы плоской поверхности жидкости равен $J = \gamma(P_S - P_V)\sqrt{m/2\pi kT}$, где P_S — давление насыщенных паров для плоской поверхности при температуре поверхности T , P_V — фактическое давление пара вблизи поверхности, m — масса молекул, k — постоянная Больцмана, а коэффициент γ учитывает отклонение от идеального уравнения и называется коэффициентом аккомодации. Если для пара использовать формулу для давления идеального газа $P = nkT$, где n — концентрация молекул в единице объема, то можно переписать закон Герца–Кнудсена для плотностей пара

$$J = \gamma(\rho_S - \rho_V)\sqrt{\frac{kT}{2\pi m}}, \quad (1)$$

где ρ_S — значение плотности насыщенных паров над плоской поверхностью при заданной температуре согласно кривой сосуществования (бинодали), ρ_V — фактическая плотность окружающих паров вблизи поверхности. Причем величина $\langle V_x^+ \rangle = \sqrt{kT/2\pi m}$ является средней скоростью молекул идеального газа, летящих по направлению к поверхности испарения (или от нее).

Очевидно, что при конденсации потока чистого пара на поверхность основные закономерности не изменяются. Меняются только знаки потока J и разности плотностей $(\rho_S - \rho_V)$.

Метод решеточных уравнений Больцмана удобен для компьютерного моделирования таких процессов, так как является методом сквозного счета границ раздела фаз жидкость–пар. В последние годы он широко применяется для этих целей [5–7]. К сожалению, до сих пор для процессов испарения и конденсации метод решеточных уравнений Больцмана использовался без детального анализа. То есть испарение и конденсация моделировались так как есть (как получается!). На то, как при этом реально моделируются испарение и конденсация, до настоящего времени не обращалось внимания.

Вместе с тем, в методе LBE имеется своя специфика, состоящая в том, что средняя безразмерная скорость псевдочастиц, летящих к поверхности, не зависит от температуры и равна $\langle V_x^+ \rangle = 1/6$ (при малых значениях безразмерной скорости флюида u). Кроме того, кинематическая вязкость флюида в методе LBE в отличие от реальных газов не зависит от температуры T , но зависит от времени релаксации в операторе столкновений. При этом в расчетах [20] для процесса испарения обнаружено, что коэффициент аккомодации зависит также от температуры и кинематической вязкости флюида.

Конкретной целью статьи является выявление особенностей процессов испарения и конденсации при моделировании двухфазных течений методом решеточных уравнений Больцмана и уточнение возможностей этой математической модели.

2. Постановка задачи. Для исследования процессов испарения и конденсации чистого пара рассматривались задачи об испарении с плоской поверхности жидкости или о конденсации пара на нее (рис. 1). Моделирование проводилось в расчетной области, имеющей форму параллелепипеда, на сетке $n_x \times n_y \times n_z$. Для этого задавалось начальное состояние системы: часть исследуемой области заполнялась жидкостью с плотностью, соответствующей кривой сосуществования при данной температуре. Для процесса испарения жидкость первоначально занимала 90% объема, а для процесса конденсации — 10%. Над плоской поверхностью жидкости задавалось состояние насыщенного пара при данной температуре. Первоначально везде принималась скорость $\mathbf{u} = 0$. В направлениях x и y использовались периодические граничные условия. На нижней границе при $z = 0$ использовались условия непротекания и непроскальзывания.

Так как резкая граница раздела в начальный момент не соответствует переходному слою

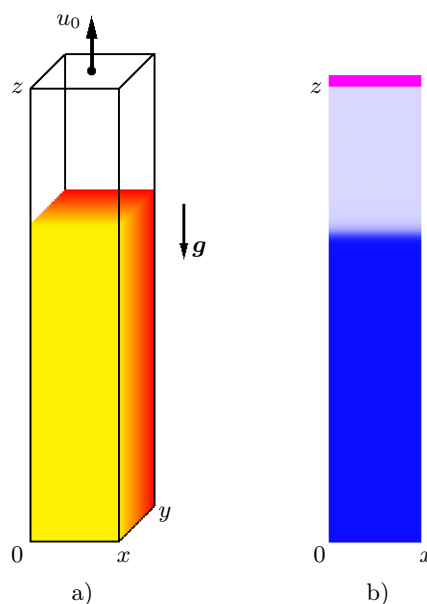


Рис. 1. К постановке задачи: а) расчетная область для трехмерного моделирования, размеры сетки $48 \times 48 \times 240$; б) распределение плотности флюида по высоте

Fig. 1. To formulation of the problem: a) computational domain for three-dimensional simulations, lattice size $48 \times 48 \times 240$; b) fluid density distribution over height

жидкость–пар в модели решеточных уравнений Больцмана (рис. 1 b), то установление состояния покоя после первичных осцилляций происходит в течение некоторого времени. Фактически для этого было достаточно 500000 шагов.

Для моделирования квазистационарных режимов испарения или конденсации жидкости необходимо удалять пар из расчетной области или подводить его. Поэтому после затухания первичных осцилляций на верхней границе расчетной области включались условия, которые обеспечивали однородный постоянный во времени поток пара вдоль оси z с безразмерной скоростью u_0 (рис. 1). Это соответствует оттоку пара при $u_0 > 0$ или притоку пара при $u_0 < 0$.

3. Метод решеточных уравнений Больцмана. Метод LBE (Lattice Boltzmann Equation) был предложен в 1988 году [21–22]. В основе данного метода лежит использование кинетического уравнения Больцмана с дискретным набором скоростей и регулярной пространственной решеткой. При этом ансамбль псевдочастиц перемещается по узлам решетки. Метод LBE широко используется для моделирования течений однофазных и двухфазных сред [23–25]. Использовались два варианта метода LBE: одномерный D1Q3 и трехмерный D3Q19. Скорости частиц c_k выбраны таким образом, чтобы все частицы за один шаг по времени перелетали в соседние узлы решетки.

В одномерной модели ограничиваются тремя векторами скорости: $c_0 = 0$, $|c_{1,-1}| = h/\Delta t$, где h — пространственный шаг сетки, Δt — шаг по времени. Для трехмерной девятнадцатискоростной модели D3Q19 использованы три значения модуля скорости $|c_k| = 0, h/\Delta t$ и $\sqrt{2}h/\Delta t$ на кубической решетке (то есть $N = 19$ векторов скорости).

Эволюция функций распределения f_k за шаг по времени имеет вид

$$f_k(\mathbf{x} + \mathbf{c}_k \Delta t, t + \Delta t) = f_k(\mathbf{x}, t) + \Omega_k \{f_k\} + \Delta f_k. \quad (2)$$

Функции распределения f_k имеют размерность плотности. Уравнение включает в себя перенос значений вдоль характеристик, оператор столкновений в форме БГК (Бхатнагара–Гросса–Крука [26])

$$\Omega_k = \frac{f_k^{\text{eq}}(\rho, \mathbf{u}) - f_k(\mathbf{x}, t)}{\tau}, \quad (3)$$

а также изменение функций распределения Δf_k из-за объемных сил (внутренних и внешних). Равновесные функции распределения f_k^{eq} обычно определяются по известной формуле [27]

$$f_k^{\text{eq}}(\rho, \mathbf{u}) = \rho w_k \left(1 + \frac{(\mathbf{c}_k \cdot \mathbf{u})}{\theta} + \frac{(\mathbf{c}_k \cdot \mathbf{u})^2}{2\theta^2} - \frac{\mathbf{u}^2}{2\theta} \right). \quad (4)$$

Здесь θ — нормированная кинетическая температура псевдочастиц, которую можно варьировать в некоторых пределах, определяемых устойчивостью метода LBE [28]. Обычно она выбирается равной $\theta = (h/\Delta t)^2/3$. Безразмерное время релаксации τ определяет значение кинематической вязкости флюида $\nu = \theta(\tau - 1/2)\Delta t$. В безразмерных переменных $\theta = 1/3$ и $\nu = (\tau - 1/2)/3$. Весовые коэффициенты для модели D1Q3 равны $w_0 = 2/3$ и $w_{1,-1} = 1/6$. Для модели D3Q19 имеем $w_0 = 1/3$, $w_{1-6} = 1/18$ и $w_{7-18} = 1/36$ [29]. Гидродинамические переменные: плотность жидкости ρ и скорость \mathbf{u} в узле вычисляются в соответствии с формулами

$$\rho = \sum_{k=0}^N f_k, \quad (5)$$

$$\rho \mathbf{u} = \sum_{k=1}^N \mathbf{c}_k f_k. \quad (6)$$

Изменения функций распределения из-за действия объемных сил вычисляются по формуле [30–32]

$$\Delta f_k(\mathbf{x}, t) = f_k^{\text{eq}}(\rho, \mathbf{u} + \Delta \mathbf{u}) - f_k^{\text{eq}}(\rho, \mathbf{u}), \quad (7)$$

где $\Delta \mathbf{u} = \mathbf{F} \Delta t / \rho$ — изменение скорости вещества за шаг по времени, \mathbf{F} — сила, действующая на вещество в узле.



4. Реализация граничных условий. Для моделирования граничных условий непротекания и непротекания на нижней стенке при $z = 0$ использовалось хорошо известное в методе LBE правило “отскока” псевдочастиц (“bounce-back” rule [33]).

В терминах гидродинамической задачи для условия квазистационарности процесса на верхней границе расчетной области необходимо задать граничные условия, соответствующие однородному потоку пара: непрерывность плотности $\frac{\partial \rho}{\partial z} = 0$ и желаемую величину скорости истечения пара вдоль оси z , то есть u_0 . Для этого за границей расчетной области (рис. 2) вводятся фиктивные узлы с координатой $n_z + 1$ (метод фиктивного интервала).

В разностном виде это соответствует условиям для плотности и скорости в фиктивных узлах сетки

$$\begin{aligned} \rho(i, j, n_z + 1) &= \rho(i, j, n_z), \\ u_z(i, j, n_z + 1) &= u_z(i, j, n_z) = u_0. \end{aligned} \quad (8)$$

Однако для задания тех или иных граничных условий в методе решеточных уравнений Больцмана необходимо занести в эти узлы соответствующие значения одночастичных функций распределения f_k . На самом деле необходимы только те функции, которые переносят информацию с границы внутрь расчетной области (входящие характеристики). Для модели D3Q19 это пять функций распределения ($f_6, f_{1d}, f_{2d}, f_{3d}$ и f_{4d}), соответствующих скоростям псевдочастиц, у которых проекции скорости \mathbf{c}_k на ось z отрицательные (рис. 2). Буквы u и d обозначают направления проекций скоростей псевдочастиц по оси z вверх (up) и вниз (down) соответственно.

Известный способ реализации граничных условий (8) состоит в следующем. Для вычисления в фиктивных узлах $n_z + 1$ соответствующих функций распределения по гидродинамическим переменным используются равновесные значения, определяемые по формуле (4). При условии, что скорость направлена вдоль оси z , то есть проекции вектора скорости имеют вид $\mathbf{u} = (0, 0, u_0)$, получаем

$$f_k(\rho(i, j, n_z + 1), u_0) = \rho w_k \left(1 + \frac{c_{kz} u_0}{\theta} + \frac{(c_{kz} u_0)^2}{2\theta^2} - \frac{u_0^2}{2\theta} \right). \quad (9)$$

Отсюда вычисляются значения пяти необходимых функций распределения $f_k(i, j, n_z + 1)$ на характеристиках $k = 6, 1d, 2d, 3d, 4d$, входящих в расчетную область (рис. 2).

Для рассматриваемых граничных условий (8) нами предлагается более простой метод задания потока пара на границе. Значения функций распределения на последнем слое расчетной области n_z согласно (4) равны

$$f_k(\rho(i, j, n_z), u_0) = \rho w_k \left(1 + \frac{c_{kz} u_0}{\theta} + \frac{(c_{kz} u_0)^2}{2\theta^2} - \frac{u_0^2}{2\theta} \right). \quad (10)$$

Сравнивая функции распределения (10) на выходящих из области характеристиках $k = 5, 1u, 2u, 3u, 4u$ при n_z (рис. 2) и функции распределения (9) на характеристиках, входящих зеркально из фиктивного слоя $n_z + 1$ при $k = 6, 1d, 2d, 3d, 4d$, получаем отношения

$$\begin{aligned} \frac{f_6(i, j, n_z + 1)}{f_5(i, j, n_z)} &= \beta, \\ \frac{f_{1d}(i, j, n_z + 1)}{f_{1u}(i, j, n_z)} &= \beta. \end{aligned} \quad (11)$$

Для функций распределения $f_{2d}(i, j, n_z + 1), f_{3d}(i, j, n_z + 1), f_{4d}(i, j, n_z + 1)$ на входящих характеристиках формулы аналогичны. Здесь безразмерный коэффициент β для квазистационарной задачи зависит только от скорости u_0 . При $\theta = 1/3$ получаем

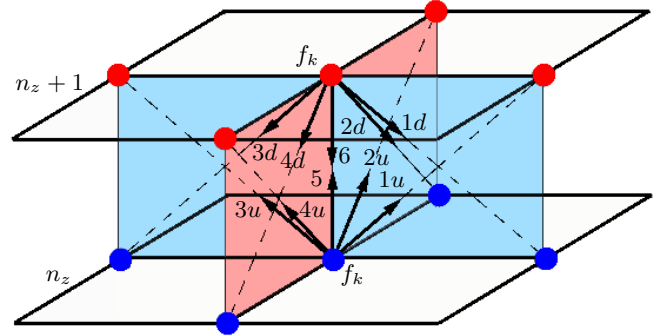


Рис. 2. Векторы характеристик для функций распределения f_k на верхней границе расчетной области

Fig. 2. Vectors of characteristics for distribution functions f_k at the upper boundary of the computational domain

$$\beta = \frac{1 - 3u_0 + 3u_0^2}{1 + 3u_0 + 3u_0^2}. \quad (12)$$

Таким образом, по величине задаваемой скорости u_0 достаточно один раз вычислить коэффициент β , на который затем умножаются известные функции распределения на последнем слое расчетной области n_z . Для одномерного случая D1Q3 эти условия получаются совсем простыми:

$$f_{-1}(n_z + 1) = \beta f_1(n_z).$$

Для процесса испарения $u_0 > 0$ и, соответственно, $\beta < 1$, а для процесса конденсации скорость u_0 задается отрицательной (приток пара), что соответствует значениям коэффициента $\beta > 1$. Получается простой и экономичный метод задания граничных условий для функций распределения в методе LBE, обеспечивающий заданную величину скорости пара u_0 на плоской границе расчетной области. Очевидно, что вычисления функций распределения по новому методу значительно эффективнее, чем вычисления по формулам (4).

5. Моделирование фазовых переходов в методе LBE. Для того чтобы во флюиде существовали фазовые переходы, необходимо смоделировать “межмолекулярное” притяжение частиц. Для этого вводятся силы, действующие на вещество в каждом узле сетки со стороны вещества в соседних узлах. Тогда суммарную силу $\mathbf{F}(\mathbf{x})$, действующую на узел, можно выразить как градиент псевдопотенциала U [34]:

$$U = P(\rho, T) - \rho\theta, \quad (13)$$

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}) = -\nabla U, \quad (14)$$

где $P(\rho, T)$ — уравнение состояния жидкости, T — температура. Если ввести специальную функцию

$$\Phi = \sqrt{-U}, \quad (15)$$

то формулу (14) для полной силы можно переписать в математически эквивалентном виде [35–38]

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}) = 2A\nabla(\Phi^2) + (1 - 2A)2\Phi\nabla\Phi. \quad (16)$$

Здесь A — безразмерный свободный параметр, который выбирается так, чтобы кривая сосуществования фаз жидкость–пар наилучшим образом соответствовала заданному уравнению состояния флюида. Комбинированная конечно-разностная форма градиента псевдопотенциала, которая получается из (16), обладает повышенной изотропией [35–39]. В векторном виде она записывается так:

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}) = \frac{1}{\alpha h} \left[A \sum_{k=1}^N G_k \Phi^2(\mathbf{x} + \mathbf{e}_k) \mathbf{e}_k + (1 - 2A)\Phi(\mathbf{x}) \sum_{k=1}^N G_k \Phi(\mathbf{x} + \mathbf{e}_k) \mathbf{e}_k \right]. \quad (17)$$

Здесь $G_k > 0$ — безразмерные коэффициенты, которые различны для основных и диагональных направлений решетки. Для основных направлений решетки коэффициенты $G_k = 1$. Для диагональных направлений в трехмерной модели D3Q19 значения коэффициентов, обеспечивающие изотропность пространства, равны $G_{7-18} = 1/2$. При этом значения безразмерного коэффициента α для изотермических моделей D1Q3 и D3Q19 равны 1 и 3 соответственно.

Для одномерного случая D1Q3 имеем

$$F(x) = [A\Phi(x + h) + (1 - 2A)\Phi(x) + A\Phi(x - h)] \frac{\Phi(x + h) - \Phi(x - h)}{h}. \quad (18)$$

Метод псевдопотенциала обеспечивает сквозной счет границ раздела фаз, т.е. жидкость и пар описываются единообразно. При этом граница раздела размывается на несколько ячеек [35].

В качестве уравнения состояния флюида использовалось уравнение состояния Ван-дер-Ваальса в так называемых “приведенных” переменных ($\tilde{P} = P/P_{кр}$, $\tilde{\rho} = \rho/\rho_{кр}$ и $\tilde{T} = T/T_{кр}$)

$$\tilde{P} = \frac{8\tilde{\rho}\tilde{T}}{3 - \tilde{\rho}} - 3\tilde{\rho}^2. \quad (19)$$



Здесь $P_{кр}$, $\rho_{кр}$ и $T_{кр}$ — давление, плотность и температура в критической точке. Для уравнения состояния Ван-дер-Ваальса оптимальным является значение $A = -0.152$ [35, 36, 38]. Далее все термодинамические величины будут записываться в этих безразмерных переменных и знак “~” будет опущен для краткости. Безразмерные координаты, время и скорости будут нормированы на значения шага расчетной решетки и шага по времени. При этом в уравнении (13) перед давлением P появляется безразмерный параметр

$$k = \frac{P_{кр}}{\rho_{кр}} \left(\frac{\Delta t}{h} \right)^2,$$

определяющий устойчивость метода LBE. В данной работе выбрано значение $k = 0.01$. Остальные уравнения в безразмерном виде выглядят без изменений. Подробнее об использовании безразмерных переменных написано в работе [28].

6. Параллельные расчеты на GPU. Для трехмерных расчетов использовался графический ускоритель (GPU, Graphics Processing Unit) Titan-V компании NVIDIA. В устройстве имеется 5120 ядер и 12 Гбайт быстрой внутренней (Global) памяти. Графические процессоры выполняют параллельные вычисления с использованием всех ядер GPU. Распараллеливание алгоритма осуществлялось при помощи технологии CUDA (Compute Unified Device Architecture).

Основой быстродействия является не только большое количество ядер в GPU, но и быстрая внутренняя память. Пропускная способность ОЗУ зависит от частоты передачи данных, разрядности шины данных и количества каналов. Для сравнения, пропускная способность современных ОЗУ при четырехканальном доступе к памяти составляет порядка 100 Гбайт/с. Пропускная способность внутренней памяти Titan-V составляет 652,8 Гбайт/с, что во много раз больше. Для использования этого преимущества необходимо, чтобы все массивы данных находились в памяти GPU. Передача данных из GPU в ОЗУ — процесс тоже не быстрый, поэтому текущие значения распределений физических величин для визуализации и сохранения текущих данных на диске передавались в ОЗУ не на каждом шаге по времени, а только через 100–500 шагов.

Алгоритм метода LBE с фазовыми переходами основан на методе расщепления по физическим процессам. Цикл вычислений для однокомпонентной модели LBE с фазовыми переходами состоит из нескольких шагов, выполняемых последовательно на каждом шаге по времени.

- 1) Применение граничных условий перед новым шагом по времени (11) и (12).
- 2) Перенос значений функций распределения вдоль характеристик в соседние узлы (2).
- 3) Вычисление новых значений плотности ρ по (5) и значений функции Φ в каждом узле с использованием уравнений (13), (15) и уравнения состояния (19).
- 4) Вычисление полной силы взаимодействия, действующей на узел, по формулам (17) для модели D3Q19 или (18) для модели D1Q3.
- 5) Вычисление значений скорости в узле (6) до действия силы и изменений скорости под действием силы.
- 6) Вычисление соответствующих равновесных функций распределения (4).
- 7) Изменение функций распределения в узлах согласно уравнению (2) за счет действия оператора столкновений (3) и за счет действия сил (7).

Параллельный алгоритм реализован путем использования ядерных функций (CUDA kernels) в соответствии с приведенным циклом вычислений. Первый шаг алгоритма выполнялся в виде “ядерных” параллельных функций для GPU — PERIOD_XY, WALL_Zdown и WALL_Zup. Второй шаг алгоритма реализован функцией MOVE. Для выполнения третьего шага алгоритма реализована функция DENSITY. Четвертый шаг алгоритма — FORCE. Пятый, шестой и седьмой шаги алгоритма были объединены в одну ядерную функцию COLLISION. Все ядерные функции выполняют относительно простые вычисления в каждом узле. Разделяемая память мультипроцессоров использовалась в режиме кэш-памяти.

Для описанного выше трехмерного (D3Q19) метода LBE моделирования процессов испарения и конденсации во внутренней памяти GPU необходимо в каждом узле иметь 19 значений функций распределения f_k плюс более 10 значений физических величин (плотность, давление, три компоненты скорости, три компоненты внутренних сил и т.д.). Для всех массивов использовались вещественные числа двойной точности (8 байт). Производительность наших расчетов с возможностью фазовых переходов жидкость–пар на сетке $48 \times 48 \times 240$ (500 тыс. узлов) оказалась около 130 млн узлов в секунду (MNUPS, Million Node

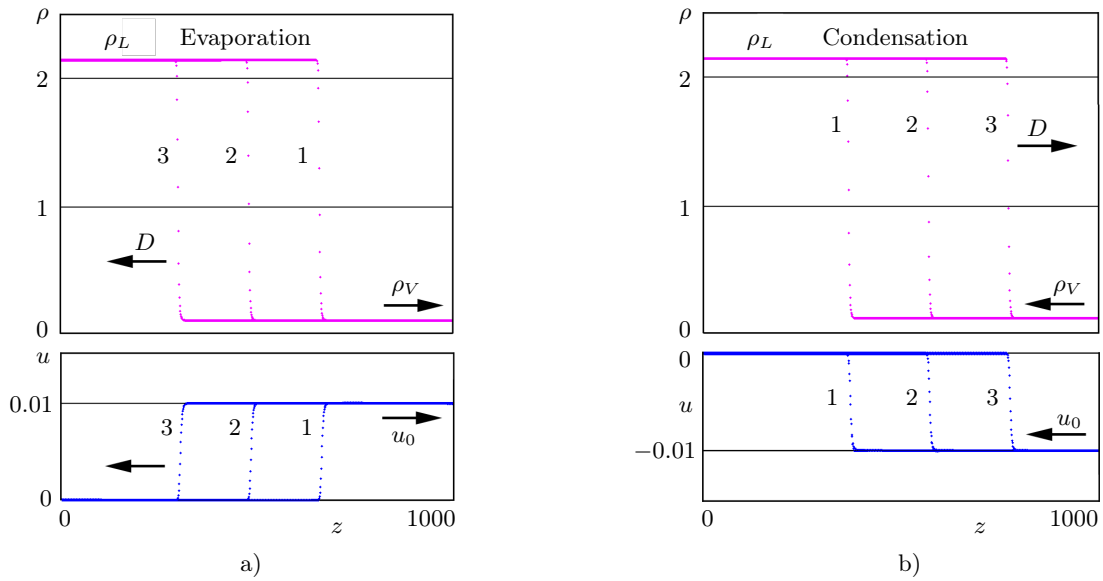


Рис. 3. Квазистационарные режимы течения вещества:
 а) волна испарения при $u_0 = 0.01$; б) волна конденсации при $u_0 = -0.01$

Fig. 3. Quasi-stationary regimes of fluid flow:
 a) evaporation wave for $u_0 = 0.01$; б) condensation wave for $u_0 = -0.01$

Updates Per Second). Расчеты показывают, что скорость обработки узлов повышается при увеличении объема используемой памяти. При этом во внутренней памяти Titan-V удастся разместить трехмерные решетки размером более 40 млн узлов. При полной загрузке памяти скорость наших расчетов методом LBE увеличивалась до 430 MNUPS.

7. Результаты расчетов. На рис. 3 показаны полученные при моделировании зависимости плотности и скорости вещества в волнах испарения (а) и конденсации (б) после выхода течений на квазистационарный режим при $t = 400000$ (1), 700000 (2), 1000000 (3) единиц метода LBE. Значения параметров: $u_0 = \pm 0.01$, $T = 0.7$, $\tau = 1$, $k = 0.01$. Течение пара при постоянной скорости u_0 становится однородным.

Затем измерялись безразмерные плотности жидкой фазы ρ_L и пара ρ_V . На основе этих данных вычислялся поток пара на верхней границе области $j = \rho_V u_0$. Скорость границы раздела фаз D вычислялась из закона сохранения потока массы через границу раздела по формуле

$$D = \frac{\rho_V u_0}{\rho_L - \rho_V}.$$

Так как жидкая фаза в нашей системе отсчета покоится, то потоки испарения или конденсации на единицу поверхности раздела фаз $J = \rho_L D$ рассчитывались по формуле

$$J = \rho_L \frac{\rho_V u_0}{\rho_L - \rho_V}.$$

Проведено сравнение результатов расчетов по одномерной D1Q3 и трехмерной D3Q19 моделям LBE при разных значениях температуры T . Использовались значения параметров $\tau = 1$, $k = 0.01$. Для процесса испарения с плоской поверхности раздела фаз при скорости оттока пара $u_0 = 0.01$ результаты представлены в табл. 1. Результаты расчетов для конденсации пара на плоской поверхности раздела фаз при скорости $u_0 = -0.01$ (приток пара) даны в табл. 2.

Результаты трехмерных расчетов по модели D3Q19 совпадают с результатами одномерных расчетов с хорошей точностью. Поэтому часть расчетов по моделированию испарения и конденсации выполнялась по одномерной модели D1Q3.

Величина плотности потока массы с единицы поверхности жидкости $J = \rho_L D$ для разных значений времени релаксации τ и температуры показана на рис. 4. В численных экспериментах получается, что зависимости потока массы от разности плотностей насыщенного и окружающего пара $\rho_S - \rho_V$ для



Таблица 1. Сравнение трехмерных (D3) и одномерных (D1) LBE расчетов при испарении
 Table 1. Comparison of three-dimensional (D3) and one-dimensional (D1) LBE calculations for evaporation

T	LBE	Плотность ρ_L Density ρ_L	Плотность ρ_V Density ρ_V	Поток J Flux J
0.6	D1	2.311	0.05603	0.0005742
	D3	2.311	0.05602	0.0005742
0.7	D1	2.1396	0.1209	0.001281
	D3	2.1398	0.1209	0.001281
0.8	D1	1.931	0.2273	0.002576
	D3	1.931	0.2272	0.002575

Таблица 2. Сравнение трехмерных (D3) и одномерных (D1) LBE расчетов при конденсации
 Table 2. Comparison of three-dimensional (D3) and one-dimensional (D1) LBE calculations for condensation

T	LBE	Плотность ρ_L Density ρ_L	Плотность ρ_V Density ρ_V	Поток J Flux J
0.6	D1	2.312	0.06368	-0.0006549
	D3	2.312	0.06360	-0.0006540
0.7	D1	2.142	0.1353	-0.001444
	D3	2.142	0.1352	-0.001443
0.8	D1	1.9358	0.25150	-0.002891
	D3	1.9362	0.25128	-0.002888

значений температуры меньших 0.9 близки к линейным вида $J = \alpha(\rho_S - \rho_V)$, что согласуется с законом Герца–Кнудсена (1). Однако коэффициент α зависит от температуры и времени релаксации. Кроме того, для конденсации значение коэффициента α немного больше, чем для испарения. Заметим, что для процесса конденсации разность плотностей $\rho_S - \rho_V$ и знак потока J имеют отрицательные значения, так что коэффициент α все равно положительный.

Были построены графики зависимости обратной величины $1/\alpha = (\rho_S - \rho_V)/J$ от времени релаксации при разных температурах и значениях u_0 для процессов испарения (рис. 5) и конденсации (рис. 6).

Все зависимости на рис. 5 и 6 близки к линейным. Это означает, что поток J обратно пропорционален величине $(\tau - 0.5)$. То есть результаты хорошо описываются формулой

$$J = \frac{b(\rho_S - \rho_V)}{\tau - 0.5},$$

где коэффициент b зависит от температуры T . Были определены средние значения коэффициентов b для процессов испарения и конденсации при разных значениях температуры (табл. 3). Эти зависимости показаны на рис. 7.

Для низких и относительно умеренных значений температуры $T \leq 0.8$ зависимость коэффициента b примерно линейная (рис. 7). Таким образом, формула для оценки потоков испарения в методе LBE имеет вид

$$J = \frac{0.13T(\rho_S - \rho_V)}{\tau - 0.5}.$$

Таблица 3. Значения коэффициентов b для процессов испарения и конденсации

Table 3. Values of coefficients b for evaporation and condensation processes

T	Коэффициент b Coefficient b	
	Испарение Evaporation	Конденсация Condensation
0.5	0.0645	0.0719
0.6	0.077	0.084
0.7	0.091	0.0971
0.8	0.107	0.118
0.9	0.131	0.144

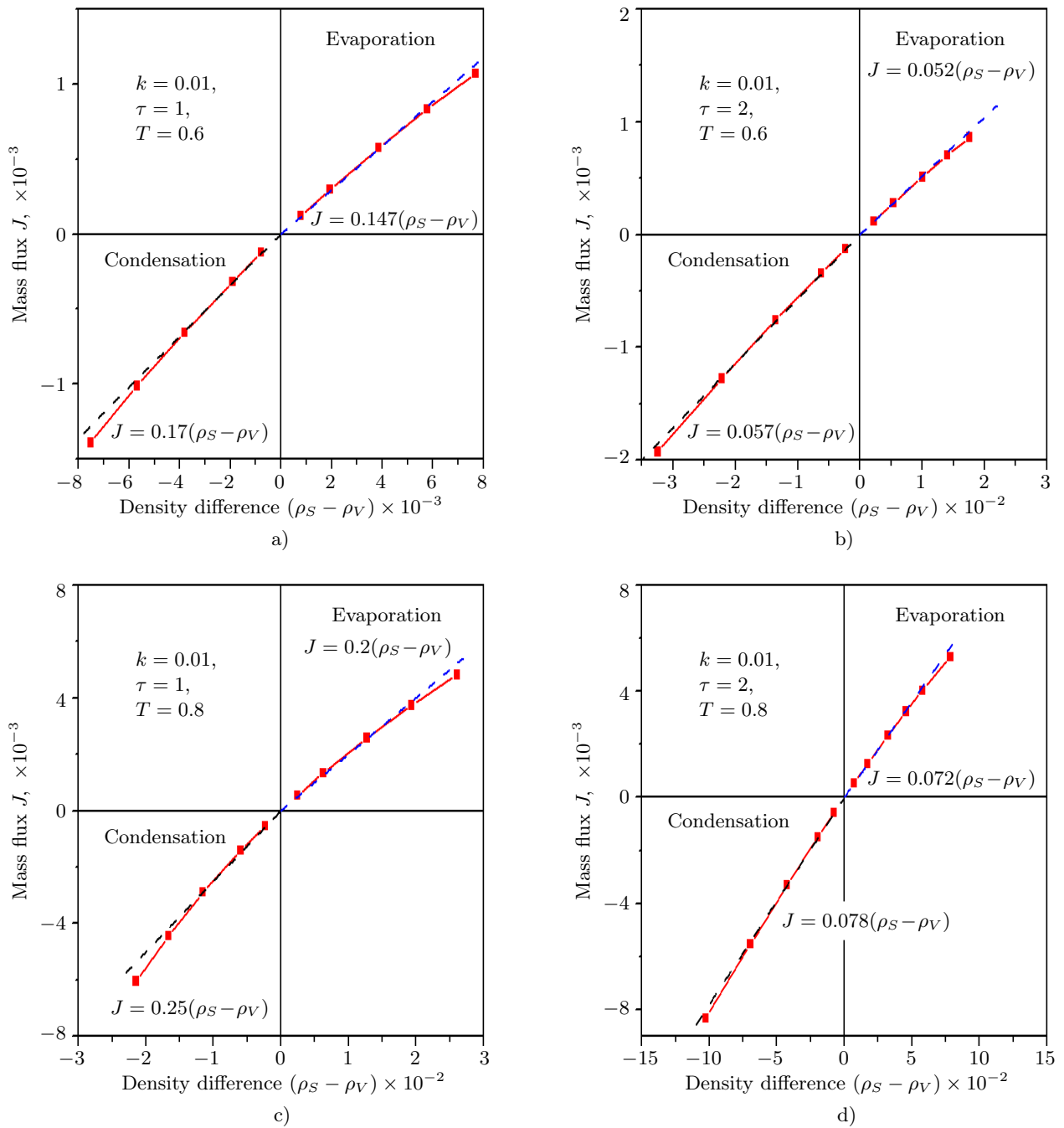


Рис. 4. Зависимость потоков испарения и конденсации на поверхности жидкости от разности между плотностью насыщенного пара при заданной температуре и плотностью пара у поверхности.
 $|u_0| = 0.002; 0.005; 0.01; 0.015; 0.02$

Fig. 4. Dependence of evaporation and condensation fluxes at the liquid surface on the difference between the density of saturated vapor at given temperatures and the vapor density at the surface.
 $|u_0| = 0.002; 0.005; 0.01; 0.015; 0.02$

Для оценки потоков конденсации получаем формулу

$$J = \frac{0.14T(\rho_S - \rho_V)}{\tau - 0.5}.$$

При приближении температуры к критической точке зависимость от температуры становится сильнее. Это может быть связано с увеличением плотности насыщенных паров, а также с увеличением тол-

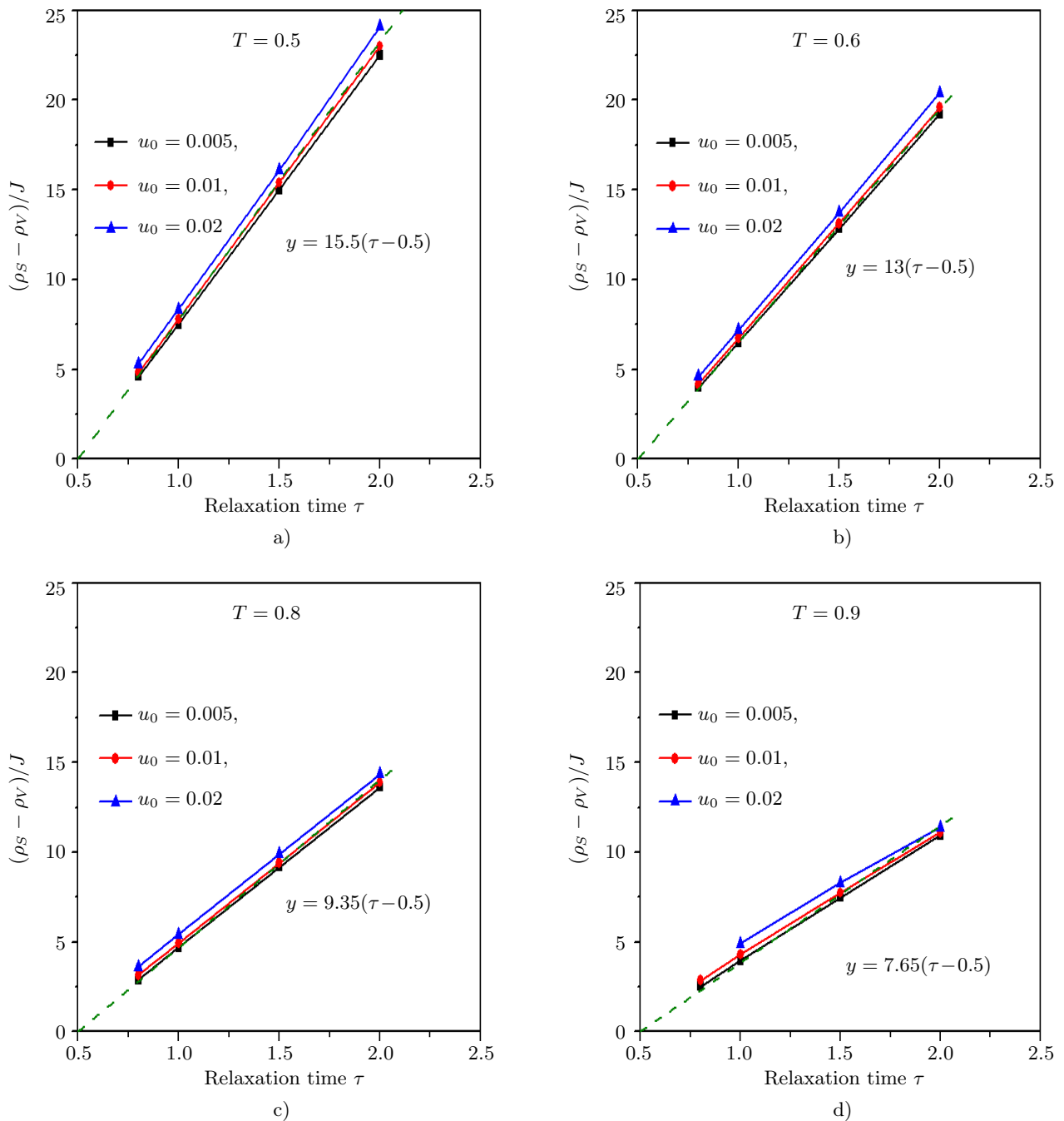


Рис. 5. Зависимость величины $(\rho_s - \rho_v)/J$ при испарении пара с поверхности жидкости от времени релаксации τ . Значения скорости оттока пара $u_0 = 0.005; 0.01; 0.02$. Значения температуры $T = 0.5, 0.6, 0.8, 0.9$

Fig. 5. Dependence of values $(\rho_s - \rho_v)/J$ during evaporation from the liquid surface on the relaxation time τ . Velocities of vapor outflow $u_0 = 0.005; 0.01; 0.02$. Temperatures $T = 0.5, 0.6, 0.8, 0.9$

щины переходного слоя жидкость–пар в методе ЛВЕ при повышении температуры.

Заметим, что кинематическая вязкость в методе ЛВЕ определяется значением времени релаксации по формуле $\nu = \theta(\tau - 1/2)\Delta t$, которая в безразмерной форме будет иметь вид $\nu = (\tau - 0.5)/3$. При этом вязкость не зависит от температуры. Тогда получаем, что поток обратно пропорционален кинематической вязкости:

$$J = \frac{\gamma T(\rho_s - \rho_v)}{\nu}. \quad (20)$$

Для процесса конденсации имеем $\gamma = 0.047$, а для испарения — $\gamma = 0.043$.

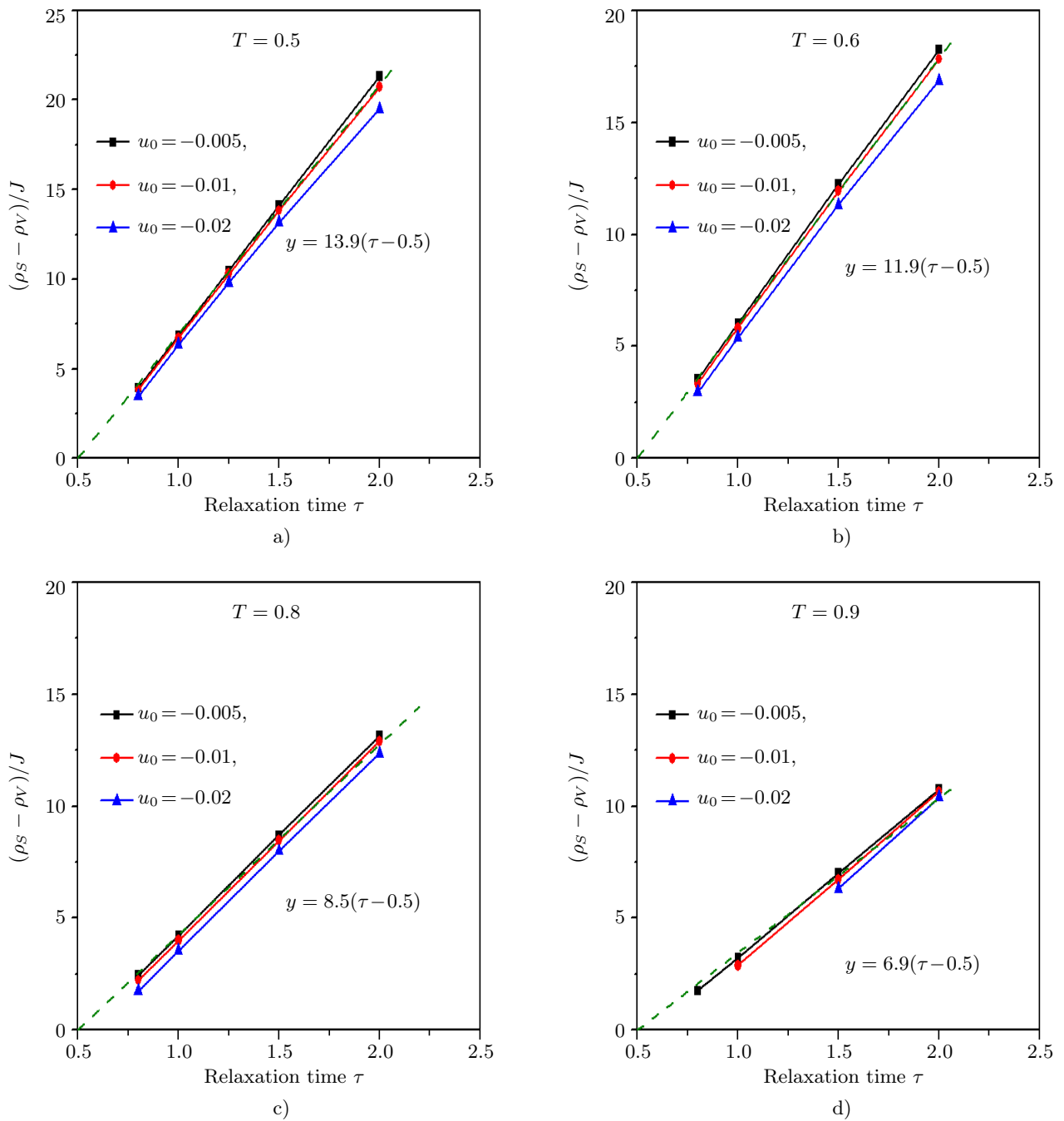


Рис. 6. Зависимость величины $(\rho_S - \rho_V)/J$ при конденсации пара на поверхности жидкости от времени релаксации τ . Значения скорости притока пара $u_0 = -0.005; -0.01; -0.02$. Значения температуры $T = 0.5, 0.6, 0.8, 0.9$

Fig. 6. Dependence of values $(\rho_S - \rho_V)/J$ during condensation of vapor at the liquid surface on the relaxation time τ . Velocities of vapor inflow $u_0 = -0.005; -0.01; -0.02$. Temperatures $T = 0.5, 0.6, 0.8, 0.9$

Зависимости давления от плотности для уравнения состояния Ван-дер-Ваальса несколько различны для пересыщенного пара и для ненасыщенного пара, в отличие от формулы для идеального газа, использованной в кинетической теории. Поэтому значения коэффициентов в формуле (20) получаются разными для конденсации и испарения. Эти отличия нарастают с увеличением потока вещества из-за увеличения разности плотностей, а также из-за увеличения общей плотности паров при приближении к критической температуре.



8. Заключение. Исследованы закономерности испарения и конденсации чистого пара в методе решеточных уравнений Больцмана. Выполнено моделирование процессов испарения и конденсации при постоянном во времени потоке пара на верхней границе расчетной области. Показано, что при этом реализуются квазистационарные режимы испарения и конденсации. Результаты трехмерного и одномерного моделирования методом ЛВЕ совпадают с высокой точностью. Предложен простой экономичный метод задания граничных условий для функций распределения в методе ЛВЕ, соответствующий заданной величине скорости потока пара на плоской границе расчетной области.

Получены формулы для оценки зависимостей потоков испарения и конденсации от разности плотностей насыщенного пара и реализуемой у границы раздела (закон Герца–Кнудсена), температуры, скорости оттока или притока пара, а также от кинематической вязкости флюида. Обнаружено, что отношение разности плотностей к потоку вещества на границе фаз при заданной температуре линейно зависит от времени релаксации как для испарения, так и для конденсации. Такая зависимость процессов испарения и конденсации от времени релаксации, которое определяет кинематическую вязкость флюида, означает, что поток вещества обратно пропорционален кинематической вязкости.

Показано, что при умеренных температурах наблюдается приближенно линейная зависимость потока от температуры. Более сильная зависимость, по сравнению с теоретической, связана с тем, что в методе ЛВЕ кинематическая вязкость не зависит от температуры, а также с увеличением толщины переходного слоя жидкость–пар при увеличении температуры. Заметим, что для процессов испарения и конденсации на поверхности раздела, имеющей кривизну, необходимо использовать плотность насыщенного пара над кривой поверхностью. Однако это предмет дальнейших исследований.

Показано, что метод ЛВЕ достаточно прост в реализации на GPU и эффективен для трехмерного моделирования течений жидкости с фазовыми переходами жидкость–пар. Расчеты показали, что скорость обработки узлов повышается при увеличении объема используемой памяти. Производительность вычислений на одном GPU Titan-V на сетке $400 \times 400 \times 256$ (40 млн узлов) составила примерно 430 млн узлов в секунду (MNUPS).

Список литературы

1. Potash M., Wayner P.C. Evaporation from a two-dimensional extended meniscus // *Int. J. Heat Mass Transf.* 1972. **15**, N 10. 1851–1863. doi 10.1016/0017-9310(72)90058-0.
2. Albernaz D.L., Do-Quang M., Amberg G. Lattice Boltzmann method for the evaporation of a suspended droplet // *Interfacial Phenomena and Heat Transfer*. 2013. **1**, N 3. 245–258. doi 10.1615/InterfacPhenomHeatTransfer.2013010175.
3. Karchevsky A.L., Marchuk I.V., Kabov O.A. Calculation of the heat flux near the liquid–gas–solid contact line // *Appl. Math. Model.* 2016. **40**, N 2. 1029–1037. doi 10.1016/j.apm.2015.06.018.
4. Ajaev V.S., Kabov O.A. Heat and mass transfer near contact lines on heated surfaces // *Int. J. Heat Mass Transf.* 2017. **108**, Part A. 918–932. doi 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2016.11.079.
5. Zhang R., Chen H. Lattice Boltzmann method for simulations of liquid–vapor thermal flows // *Phys. Rev. E*. 2003. **67**, N 6. doi 10.1103/PhysRevE.67.066711.
6. Moiseev M.I., Fedoseev A., Shugaev M.V., Surtaev A.S. Hybrid thermal lattice Boltzmann model for boiling heat transfer on surfaces with different wettability // *Interfacial Phenomena and Heat Transfer*. 2020. **8**, N 1. 81–91. doi 10.1615/InterfacPhenomHeatTransfer.2020033929.

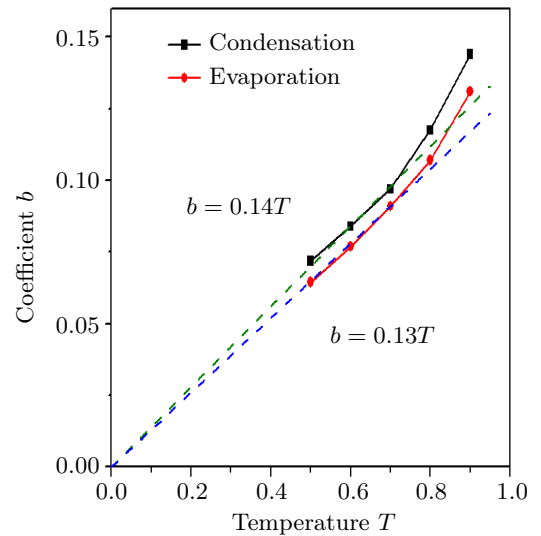


Рис. 7. Зависимость коэффициента b от температуры для процессов испарения и конденсации на плоской поверхности раздела фаз

Fig. 7. Dependence of coefficient b on temperature for evaporation and condensation processes at the flat interface between phases

7. Сатенова Б.А., Жакебаев Д.Б., Каруна О.Л. Моделирование процесса испарения жидкости методом фазового поля и решеточного уравнения Больцмана // Вестник КазНУ. Серия математика, механика, информатика. 2021. 111, № 3. 107–121. <https://bm.kaznu.kz/index.php/kaznu/article/view/954/624>. Дата обращения: 20 октября 2022.
8. Федорец А.А., Марчук И.В., Кабов О.А. О роли потока пара в механизме левитации диссипативной структуры капельный кластер // Письма в журнал технической физики. 2011. 37, № 3. 45–50.
9. Fedorets A.A., Marchuk I.V., Kabov O.A. Coalescence of a droplet cluster suspended over a locally heated liquid layer // Interfacial Phenomena and Heat Transfer. 2013. 1, N 1. 51–62. doi 10.1615/InterfacPhenomHeatTransfer.2013007434.
10. Kabov O.A., Zaitsev D.V., Kirichenko D.P., Ajaev V.S. Investigation of moist air flow near contact line using microdroplets as tracers // Interfacial Phenomena and Heat Transfer. 2016. 4, N 2–3. 207–216. doi 10.1615/InterfacPhenomHeatTransfer.2017020203.
11. Zaitsev D.V., Kirichenko D.P., Shatekova A.I., Ajaev V.S., Kabov O.A. Experimental and theoretical studies of ordered arrays of microdroplets levitating over liquid and solid surfaces // Interfacial Phenomena and Heat Transfer. 2018. 6, N 3. 219–230. doi 10.1615/InterfacPhenomHeatTransfer.2019029816.
12. Leidenfrost J.G. De aquae communis nonnullis qualitatibus tractatus. Duisburg: Ovenius, 1756.
13. Жаховский В.В., Анисимов С.И. Численное моделирование испарения жидкости методом молекулярной динамики // Журнал экспериментальной и теоретической физики. 1997. 111, № 4. 1328–1346. doi 10.1134/1.558192.
14. Meland R., Frezzotti A., Yttrhus T., Hafskjold B. Nonequilibrium molecular-dynamics simulation of net evaporation and net condensation, and evaluation of the gas-kinetic boundary condition at the interphase // Phys. Fluids. 2004. 16, N 2. 223–243. doi 10.1063/1.1630797.
15. Graur I.A., Gatapova E.Ya., Wolf M., Batueva M.A. Non-equilibrium evaporation: 1D benchmark problem for single gas // International Journal of Heat and Mass Transfer. 2021. 181. doi 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2021.121997.
16. Graur I.A., Batueva M.A., Wolf M., Gatapova E.Ya. Non-equilibrium condensation // International Journal of Heat and Mass Transfer. 2022. 198. doi 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2022.123391.
17. Хирс Д., Паунд Г. Испарение и конденсация. М.: Металлургия, 1966.
18. Labuntsov D.A., Kryukov A.P. Analysis of intensive evaporation and condensation // Int. J. Heat Mass Transfer. 1979. 22, N 7. 989–1002. doi 10.1016/0017-9310(79)90172-8.
19. Eames I.W., Marr N.J., Sabir H. The evaporation coefficient of water: a review // Int. J. Heat Mass Transfer. 1997. 40, N 12. 2963–2973. doi 10.1016/S0017-9310(96)00339-0.
20. Kupershtokh A.L. An evaporation flux of pure vapor in the method of lattice Boltzmann equations // Journal of Physics: Conference Series. 2021. 2057. doi 10.1088/1742-6596/2057/1/012070.
21. McNamara G.R., Zanetti G. Use of the Boltzmann equation to simulate lattice-gas automata // Physical Review Letters. 1988. 61, N 20. 2332–2335. doi 10.1103/PhysRevLett.61.2332.
22. Higuera F.J., Jiménez J. Boltzmann approach to lattice gas simulations // Europhys. Lett. 1989. 9, N 7. 663–668. doi 10.1209/0295-5075/9/7/009.
23. Chen S., Doolen G.D. Lattice Boltzmann method for fluid flows // Annu. Rev. Fluid Mech. 1998. 30, N 1. 329–364. doi 10.1146/annurev.fluid.30.1.329.
24. Aidun C.K., Clausen J.R. Lattice-Boltzmann Method for Complex Flows // Annu. Rev. Fluid Mech. 2010. 42, N 1. 439–472. doi 10.1146/annurev-fluid-121108-145519.
25. Krüger T., Kusumaatmaja H., Kuzmin A., Shardt O., Silva G., Viggen E.M. The lattice Boltzmann method: principles and practice. Springer: Cham, 2017.
26. Bhatnagar P.L., Gross E.P., Krook M. A model for collision processes in gases. I. Small amplitude process in charged and neutral one-component systems // Phys. Rev. 1954. 94, N 3. 511–525. doi 10.1103/PhysRev.94.511.
27. Koelman J.M.V.A. A simple lattice Boltzmann scheme for Navier–Stokes fluid flow // Europhys. Lett. 1991. 15, N 6. 603–607. doi 10.1209/0295-5075/15/6/007.
28. Kupershtokh A.L. Criterion of numerical instability of liquid state in LBE simulations // Computers and Mathematics with Applications. 2010. 59, N 7. 2236–2245. doi 10.1016/j.camwa.2009.08.058.
29. Qian Y.-H., d’Humières D., Lallemand P. Lattice BGK models for Navier–Stokes equation // Europhys. Lett. 1992. 17, N 6. 479–484. doi 10.1209/0295-5075/17/6/001.



30. Kupershtokh A.L. New method of incorporating a body force term into the lattice Boltzmann equation // Proc. 5th Int. EHD Workshop, Poitiers, France, August 30–31, 2004. Poitiers: University of Poitiers, 2004. 241–246. <http://ancient.hydro.nsc.ru/sk/EHD-2004/FR2004-LBE.pdf>. Cited October 20, 2022.
31. Куперштох А.Л. Учет действия объемных сил в решеточных уравнениях Больцмана // Вестн. НГУ. Серия “Математика, механика и информатика”. 2004. 4, № 2. 75–96. <http://ancient.hydro.nsc.ru/sk/VESTNIK/Vestn-NGU-2004.pdf>. Дата обращения: 20 октября 2022.
32. Куперштох А.Л. Трехмерное моделирование двухфазных систем типа жидкость–пар методом решеточных уравнений Больцмана на GPU // Вычислительные методы и программирование. 2012. 13, № 1. 130–138. <https://num-meth.ru/index.php/journal/article/view/505>. Дата обращения: 20 октября 2022.
33. Hardy J., de Pazzis O., Pomeau Y. Molecular dynamics of a classical lattice gas: transport properties and time correlation functions // Phys. Rev. A. 1976. 13, N 5. 1949–1961. doi 10.1103/PhysRevA.13.1949.
34. Qian Y.-H., Chen S. Finite size effect in lattice-BGK models // International Journal of Modern Physics C. 1997. 8, N 4. 763–771. doi 10.1142/S0129183197000655.
35. Куперштох А.Л. Моделирование течений с границами раздела фаз жидкость–пар методом решеточных уравнений Больцмана // Вестник НГУ. Серия “Математика, механика и информатика”. 2005. 5, N 3. 29–42. <https://lib.nsu.ru/xmlui/handle/nsu/5214>. Дата обращения: 20 октября 2022.
36. Kupershtokh A.L., Medvedev D.A., Karpov D.I. On equations of state in a lattice Boltzmann method // Computers and Mathematics with Applications. 2009. 58, N 5. 965–974. doi 10.1016/j.camwa.2009.02.024.
37. Kupershtokh A.L., Ermanyuk E.V., Gavrilov N.V. The rupture of thin liquid films placed on solid and liquid substrates in gravity body forces // Communications in Computational Physics. 2015. 17, N 5. 1301–1319. doi 10.4208/cicp.2014.m340.
38. Kupershtokh A.L., Medvedev D.A. Lattice Boltzmann method in hydrodynamics and thermophysics // J. Phys. Conf. Ser. 2018. 1105. doi 10.1088/1742-6596/1105/1/012058.
39. Куперштох А.Л., Медведев Д.А., Грибанов И.И. Моделирование теплопереноса в среде с фазовыми переходами методом решеточных уравнений Больцмана // Вычислительные методы и программирование. 2014. 15, № 2. 317–328. <https://num-meth.ru/index.php/journal/article/view/770>. Дата обращения: 20 октября 2022.

Поступила в редакцию
16 июля 2022 г.

Принята к публикации
30 сентября 2022 г.

Информация об авторах

Александр Леонидович Куперштох — д.ф.-м.н., зав. лаб.; Институт гидродинамики имени М. А. Лаврентьева СО РАН, просп. Лаврентьева, 15, 630090, Новосибирск, Российская Федерация.

Антон Владимирович Альянов — младший научный сотрудник; Институт гидродинамики имени М. А. Лаврентьева СО РАН, просп. Лаврентьева, 15, 630090, Новосибирск, Российская Федерация.

References

1. M. Potash and P. C. Wayner, “Evaporation from a Two-Dimensional Extended Meniscus,” Int. J. Heat Mass Transf. 15 (10), 1851–1863 (1972). doi 10.1016/0017-9310(72)90058-0.
2. D. L. Albernaz, M. Do-Quang, and G. Amberg, “Lattice Boltzmann Method for the Evaporation of a Suspended Droplet,” Interfacial Phenom. Heat Transf. 1 (3), 245–258 (2013). doi 10.1615/InterfacPhenomHeatTransfer.2013010175.
3. A. L. Karchevsky, I. V. Marchuk, and O. A. Kabov, “Calculation of the Heat Flux near the Liquid–Gas–Solid Contact Line,” Appl. Math. Model. 40 (2), 1029–1037 (2016). doi 10.1016/j.apm.2015.06.018.
4. V. S. Ajaev and O. A. Kabov, “Heat and Mass Transfer near Contact Lines on Heated Surfaces,” Int. J. Heat Mass Transf. 108, Part A, 918–932 (2017). doi 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2016.11.079.
5. R. Zhang and H. Chen, “Lattice Boltzmann Method for Simulations of Liquid–Vapor Thermal Flows,” Phys. Rev. E 67 (6) (2003). doi 10.1103/PhysRevE.67.066711.
6. M. I. Moiseev, A. Fedoseev, M. V. Shugaev, and A. S. Surtaev, “Hybrid Thermal Lattice Boltzmann Model for Boiling Heat Transfer on Surfaces with Different Wettability,” Interfacial Phenom. Heat Transf. 8 (1), 81–91 (2020). doi 10.1615/InterfacPhenomHeatTransfer.2020033929.

7. B. A. Satenova, D. B. Zhakebayev, and O. L. Karuna, “Simulation of Nucleate Boiling Bubble by the Phase-Field and Lattice Boltzmann Method,” *J. Math. Mech. Comput. Sci.* **111** (3), 107–121 (2021). doi [10.26577/JMMCS.2021.v111.i3.09](https://doi.org/10.26577/JMMCS.2021.v111.i3.09).
8. A. A. Fedorets, I. V. Marchuk, and O. A. Kabov, “Role of Vapor Flow in the Mechanism of Levitation of a Droplet–Cluster Dissipative Structure,” *Pis'ma Zh. Tekh. Fiz.* **37** (3), 45–50 (2011) [*Tech. Phys. Lett.* **37** (2), 116–118 (2011)]. doi [10.1134/S1063785011020064](https://doi.org/10.1134/S1063785011020064).
9. A. A. Fedorets, I. V. Marchuk, and O. A. Kabov, “Coalescence of a Droplet Cluster Suspended over a Locally Heated Liquid Layer,” *Interfacial Phenom. Heat Transf.* **1** (1), 51–62 (2013). doi [10.1615/InterfacPhenomHeatTransfer.2013007434](https://doi.org/10.1615/InterfacPhenomHeatTransfer.2013007434).
10. O. A. Kabov, D. V. Zaitsev, D. P. Kirichenko, and V. S. Ajaev, “Investigation of Moist Air Flow near Contact Line Using Microdroplets as Tracers,” *Interfacial Phenom. Heat Transf.* **4** (2–3), 207–216 (2016). doi [10.1615/InterfacPhenomHeatTransfer.2017020203](https://doi.org/10.1615/InterfacPhenomHeatTransfer.2017020203).
11. D. V. Zaitsev, D. P. Kirichenko, A. I. Shatekova, et al., “Experimental and Theoretical Studies of Ordered Arrays of Microdroplets Levitating over Liquid and Solid Surfaces,” *Interfacial Phenom. Heat Transf.* **6** (3), 219–230 (2018). doi [10.1615/InterfacPhenomHeatTransfer.2019029816](https://doi.org/10.1615/InterfacPhenomHeatTransfer.2019029816).
12. J. G. Leidenfrost, *De Aquae Communis Nonnullis Qualitatibus Tractatus* (Ovenius, Duisburg, 1756).
13. V. V. Zhakhovskii and S. I. Anisimov, “Molecular-Dynamics Simulation of Evaporation of a Liquid,” *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **111** (4), 1328–1346 (1997) [*J. Exp. Theor. Phys.* **84** (4), 734–745 (1997)]. doi [10.1134/1.558192](https://doi.org/10.1134/1.558192).
14. R. Meland, A. Frezzotti, T. Ytrehus, and B. Hafskjold, “Nonequilibrium Molecular-Dynamics Simulation of Net Evaporation and Net Condensation, and Evaluation of the Gas-Kinetic Boundary Condition at the Interphase,” *Phys. Fluids.* **16** (2), 223–243 (2004). doi [10.1063/1.1630797](https://doi.org/10.1063/1.1630797).
15. I. A. Graur, E. Ya. Gatapova, M. Wolf, and M. A. Batueva, “Non-Equilibrium Evaporation: 1D Benchmark Problem for Single Gas,” *Int. J. Heat Mass Transf.* **181** (2021). doi [10.1016/j.ijheatmasstransfer.2021.121997](https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2021.121997).
16. I. A. Graur, M. A. Batueva, M. Wolf, and E. Ya. Gatapova, “Non-Equilibrium Condensation,” *Int. J. Heat Mass Transf.* **198** (2022). doi [10.1016/j.ijheatmasstransfer.2022.123391](https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2022.123391).
17. J. P. Hirth and G. M. Pound, *Condensation and Evaporation* (Pergamon Press, Oxford, 1963).
18. D. A. Labuntsov and A. P. Kryukov, “Analysis of Intensive Evaporation and Condensation,” *Int. J. Heat Mass Transf.* **22** (7), 989–1002 (1979). doi [10.1016/0017-9310\(79\)90172-8](https://doi.org/10.1016/0017-9310(79)90172-8).
19. I. W. Eames, N. J. Marr, and H. Sabir, “The Evaporation Coefficient of Water: A Review,” *Int. J. Heat Mass Transf.* **40** (12), 2963–2973 (1997). doi [10.1016/S0017-9310\(96\)00339-0](https://doi.org/10.1016/S0017-9310(96)00339-0).
20. A. L. Kupershtokh, “An Evaporation Flux of Pure Vapor in the Method of Lattice Boltzmann Equations,” *J. Phys.: Conf. Ser.* **2057** (2021). doi [10.1088/1742-6596/2057/1/012070](https://doi.org/10.1088/1742-6596/2057/1/012070).
21. G. R. McNamara and G. Zanetti, “Use of the Boltzmann Equation to Simulate Lattice-Gas Automata,” *Phys. Rev. Lett.* **61** (20), 2332–2335 (1988). doi [10.1103/PhysRevLett.61.2332](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.61.2332).
22. F. J. Higuera and J. Jiménez, “Boltzmann Approach to Lattice Gas Simulations,” *Europhys. Lett.* **9** (7), 663–668 (1989). doi [10.1209/0295-5075/9/7/009](https://doi.org/10.1209/0295-5075/9/7/009).
23. S. Chen and G. D. Doolen, “Lattice Boltzmann Method for Fluid Flows,” *Annu. Rev. Fluid Mech.* **30** (1), 329–364 (1998). doi [10.1146/annurev.fluid.30.1.329](https://doi.org/10.1146/annurev.fluid.30.1.329).
24. C. K. Aidun and J. R. Clausen, “Lattice-Boltzmann Method for Complex Flows,” *Annu. Rev. Fluid Mech.* **42** (1), 439–472 (2010). doi [10.1146/annurev-fluid-121108-145519](https://doi.org/10.1146/annurev-fluid-121108-145519).
25. T. Krüger, H. Kusumaatmaja, A. Kuzmin, et al., *The Lattice Boltzmann Method: Principles and Practice* (Springer, Cham, 2017).
26. P. L. Bhatnagar, E. P. Gross, and M. Krook, “A Model for Collision Processes in Gases. I. Small Amplitude Process in Charged and Neutral One-Component Systems,” *Phys. Rev.* **94** (3), 511–525 (1954). doi [10.1103/PhysRev.94.511](https://doi.org/10.1103/PhysRev.94.511).
27. J. M. V. A. Koelman, “A Simple Lattice Boltzmann Scheme for Navier–Stokes Fluid Flow,” *Europhys. Lett.* **15** (6), 603–607 (1991). doi [10.1209/0295-5075/15/6/007](https://doi.org/10.1209/0295-5075/15/6/007).
28. A. L. Kupershtokh, “Criterion of Numerical Instability of Liquid State in LBE Simulations,” *Comput. Math. Appl.* **59** (7), 2236–2245 (2010). doi [10.1016/j.camwa.2009.08.058](https://doi.org/10.1016/j.camwa.2009.08.058).
29. Y.-H. Qian, D. d’Humières, and P. Lallemand, “Lattice BGK Models for Navier–Stokes Equation,” *Europhys. Lett.* **17** (6), 479–484 (1992). doi [10.1209/0295-5075/17/6/001](https://doi.org/10.1209/0295-5075/17/6/001).
30. A. L. Kupershtokh, “New Method of Incorporating a Body Force Term into the Lattice Boltzmann Equation,” in *Proc. 5th Int. EHD Workshop, Poitiers, France, August 30–31, 2004* (Univ. of Poitiers, Poitiers, 2004), pp. 241–246. <http://ancient.hydro.nsc.ru/sk/EHD-2004/FR2004-LBE.pdf>. Cited October 20, 2022.



31. A. L. Kupershtokh, “Incorporating a Body Force Term into the Lattice Boltzmann Equation,” *Vestn. Novosib. Gos. Univ., Ser.: Mat., Mekh., Inform.* **4** (2) 75–96 (2004). <http://ancient.hydro.nsc.ru/sk/VESTNIK/Vestn-NGU-2004.pdf>. Cited October 20, 2022.
32. A. L. Kupershtokh, “Three-Dimensional Simulations of Two-Phase Liquid–Vapor Systems on GPU Using the Lattice Boltzmann Method,” *Numer. Methods Program.* **13** (1), 130–138 (2012). <https://num-meth.ru/index.php/journal/article/view/505>. Cited October 20, 2022.
33. J. Hardy, O. de Pazzis, and Y. Pomeau, “Molecular Dynamics of a Classical Lattice Gas: Transport Properties and Time Correlation Functions,” *Phys. Rev. A* **13** (5), 1949–1961 (1976). doi 10.1103/PhysRevA.13.1949.
34. Y.-H. Qian and S. Chen, “Finite Size Effect in Lattice-BGK Models,” *Int. J. Mod. Phys. C* **8** (4), 763–771 (1997). doi 10.1142/S0129183197000655.
35. A. L. Kupershtokh, “Simulation of Flows with Liquid–Vapor Interfaces by the Lattice Boltzmann Method,” *Vestn. Novosib. Gos. Univ., Ser.: Mat., Mekh., Inform.* **5** (3), 29–42 (2005). <https://lib.nsu.ru/xmlui/handle/nsu/5214>. Cited October 20, 2022.
36. A. L. Kupershtokh, D. A. Medvedev, and D. I. Karpov, “On Equations of State in a Lattice Boltzmann Method,” *Comput. Math. Appl.* **58** (5), 965–974 (2009). doi 10.1016/j.camwa.2009.02.024.
37. A. L. Kupershtokh, E. V. Ermanyuk, and N. V. Gavrilov, “The Rupture of Thin Liquid Films Placed on Solid and Liquid Substrates in Gravity Body Forces,” *Commun. Comput. Phys.* **17** (5), 1301–1319 (2015). doi 10.4208/cicp.2014.m340.
38. A. L. Kupershtokh and D. A. Medvedev, “Lattice Boltzmann Method in Hydrodynamics and Thermophysics,” *J. Phys.: Conf. Ser.* **1105** (2018). doi 10.1088/1742-6596/1105/1/012058.
39. A. L. Kupershtokh, D. A. Medvedev, and I. I. Griбанov, “Modeling of Thermal Flows in a Medium with Phase Transitions Using the Lattice Boltzmann Method,” *Numer. Methods Program.* **15** (2), 317–328 (2014). <https://num-meth.ru/index.php/journal/article/view/770>. Cited October 20, 2022.

Received
July 16, 2022

Accepted for publication
September 30, 2022

Information about the authors

Alexandr L. Kupershtokh — Dr. Sci., Head of Laboratory; Lavrentyev Institute of Hydrodynamics SB RAS, Lavrentyev prospekt, 15, 630090, Novosibirsk, Russia.

Anton V. Alyanov — Junior Research Scientist; Lavrentyev Institute of Hydrodynamics SB RAS, Lavrentyev prospekt, 15, 630090, Novosibirsk, Russia.