1 Постановка задачи

В безграничном объёме расплава на глубине около 30 км рассматривается одиночный пузырёк газа, наполненный смесью углекислого газа и водяного пара. Оба газа предполагаются совершенными (или с известной таблицей свойств). Подъём пузырьков предполагается значительно медленнее процессов массообмена с окружающим расплавом и скоростью движения границы пузырька, поэтому в модели рассматривается покоящийся единичный пузырёк. Также, изменениее температуры полагается пренебрежимо малым. Давление в окружающем расплаве предполагается постоянными, равным давлению насыщенного пара за вычетом $\Delta P \approx 1 - 10MPa$.

В замкнутую систему уравнений входят следующие зависимости:
1) Уравнения диффузии для газов:

$$\frac{\partial c_s}{\partial t} + \nu_r \frac{\partial c_s}{\partial r} = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(D_s r^2 \frac{\partial c_s}{\partial r});\ s = c, w; \quad \nu_r = \frac{dR}{dt}$$

2) Уравнение баланса импульса на границе раздела расплав/газ:

$$P_g - P_m = \frac{2\sigma}{R} + 4\mu_e(\frac{1}{R} - \frac{R^2}{S^3})$$

$$S = (S_0^3 - R_0^3 + R^3)^{1/3}; \quad \mu_e = \int\limits_R^S \frac{\mu(r, c_w)}{r^4} dr$$

3) Уравнение баланса массы на границе раздела расплав/газ:

$$\frac{4\pi}{3}\frac{d}{dt}(R^3\rho_g) = 4\pi R^2 \rho_m [D_c(\frac{\partial c_c}{\partial r})_{r=R} + D_w(\frac{\partial c_w}{\partial r})_{r=R}]$$

$$D_i = D_i(c_w) \text{ — известные функции;} \quad \rho_m = const$$

4) Уравнение состояния совершенного газа (или таблица для поиска связи давления с плотностью):

$$\frac{4\pi}{3}R^3 = \rho_g \tilde{R}\frac{T}{P_g}$$

2 Численная схема уравнений диффузии

Сделаем замену координат в представленных уравнениях. Возьмём следующую замену:

$$\xi = \frac{r - R}{S - R}$$

такую что $r = R$ $\xi = 0$, $r = S$ $\xi = 1$.

В уравнении 4 изменений нет, в уравнении 2

$$\tilde{\mu_e} = (S - R)\int\limits_0^1 \frac{\mu(\xi, c_w)}{(\xi(S - R) + R)^4} d\xi$$

В уравнении 3 правая часть принимает вид

$$4\pi R\rho_m \left[D_c \left.\frac{\partial c_c}{\partial \xi}\right|_{\xi=0} + D_w \left.\frac{\partial c_w}{\partial \xi}\right|_{\xi=0} \right]$$

Для рассматриваемой замены координат имеем следующее:

$$\frac{\partial f}{\partial r} = \frac{\partial f}{\partial \xi}\frac{\partial \xi}{\partial r}; \quad \frac{\partial f(x,t)}{\partial t} = \frac{\partial f(\xi,t)}{\partial t} + \frac{\partial f(\xi,t)}{\partial \xi}\frac{\partial \xi}{\partial t}$$

Используя эти правила, получим:

$$\frac{\partial \xi}{\partial r} = \frac{1}{S - R}; \quad \frac{\partial \xi}{\partial t} = \frac{\dot{R}(\xi - 1) - \dot{S}\xi}{S - R}$$

Для первого уравнения

$$\frac{\partial c_s}{\partial t} + \nu_r \frac{\partial c_s}{\partial r} = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(D_s r^2 \frac{\partial c_s}{\partial r})$$

выполним вышеуказанную подстановку. После приведения членов, получим:

$$\frac{\partial c_s}{\partial t} + \dot{R}\frac{\partial c_s}{\partial \xi}\left(\frac{1 - \dot{R}(\xi - 1) - \dot{S}\xi}{S - R}\right) = \frac{1}{(S - R)^2} D_s \left(2\frac{(S - R)}{\xi(S - R) + R} + \frac{\partial^2 c_s}{\partial \xi^2}\right)$$

Проинтегрируем это уравнение по отрезкам от ξ_i до ξ_j, умноженное на ξ^2. Проинтегрируем каждое слагаемое отдельно.

$$\int\limits_{\xi_i}^{\xi_j} \xi^2 \frac{\partial c_s}{\partial t} d\xi = \frac{1}{3}\frac{\partial c_s}{\partial t}\xi^3 \quad (1)$$

$$\frac{\dot{R}}{S-R}\int\limits_{\xi_i}^{\xi_j}\xi^2\frac{\partial c_s}{\partial \xi}\left(\frac{1-\dot{R}(\xi-1)-\dot{S}\xi}{S-R}\right)d\xi=\frac{\dot{R}}{S-R}\left[\xi^2 c_s(1-\right.$$

$$\left.-\dot{R}(\xi-1)-\dot{S}\xi)+(\dot{R}+\dot{S})c_s(\theta)\frac{\xi^3}{3}\right] \quad (2)$$

$$\frac{D_s}{(S-R)^2}\int_{\xi_i}^{\xi_j}\left(2\frac{(S-R)}{\xi(S-R)+R}+\frac{\partial^2 c_s}{\partial \xi^2}\right)\xi^2 d\xi=\frac{D_s}{(S-R)^2}\left[2\frac{R^2 ln\left((S-R)\xi+R\right)}{2(S-R)^2}+\right.$$

$$\left.+\frac{(S-R)\xi((S-R)\xi-2R)}{2(S-R)^2}+\frac{\partial c_s}{\partial \xi}\xi^2-\frac{\partial c_s(\theta)}{\partial \xi}\xi^2\right] \quad (3)$$

В уравнениях выше полагается, что в правой части стоит разница между значениями на концах промежутка интегрирования, функции от θ — значения в промежуточной точке, которые можно вычислять как среднее от значений в крайних.

3 Схема решения

После того, как заданы внешние зависимости, граничные и начальные условия, система уравнений решается следующим образом. Делается шаг по времени, предполагается некоторое значение R. Далее решается уравнение 1, из которого становятся известными концентрации газов в расплаве. Из уравнения 3 получаем плотность ρ_g. Теперь из уравнений 2 и 4 независимо получаются давления p_g. Если разница между полученными давлениями меньше, чем некторое значение ошибки, то делается новая иттерация. Когда достигается приемлимая разница, можно сделать следующий шаг по времени.