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) Уравнение неразрывности для расплава:

$$\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\nu_r\right); \quad \nu_r|_{r=R} = \frac{dR}{dt}$$

2) Уравнения диффузии для газов:

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

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

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

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

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

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

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

5) 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 Решение уравнения неразрывности

Поскольку данное уравнение превращается в ОДУ с функциями, зависящами от r, выпишем его и его решение:

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\nu_r\right) = 0$$

$$\frac{\partial \nu_r}{\partial r} + \frac{2}{r}\nu_r = 0$$

С граничным условием $\nu_r|_{r=R} = \dot{R}$ получаем слудующее решение:

$$\nu_r = \frac{1}{r^2}\dot{R}R^2$$

3 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 5 изменений нет, в уравнении 3

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

В уравнении 4 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 2 уравнения, после подстановки решения ν_r, имеем:

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

Выполним вышеуказанную подстановку. После приведения членов, получим:

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

Для второго слагаемого введём обозначение для числителя выражения в квадратных скобках после приведения к общему знаменателю:

$$\kappa(\xi,t) = \left(\dot{R}(\xi-1) - \dot{S}\xi\right)\left(\xi^2(S-R)^2 + R^2 + 2R\xi(S-R)\right) + \dot{R}R^2$$

Получаем

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

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.

4 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.