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:
10) 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:

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

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

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

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

$D_i = D_i(c_w)$ — известные функции; $\rho_m = const$

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: $\xi = \dfrac{r-R}{S-R}$, 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 $4\pi R\rho_m[D_c\ \frac{\partial c_c}{\partial \xi}\Big|_{\xi=0} + D_w\ \frac{\partial c_w}{\partial \xi}\Big|_{\xi=0}]$.

Для первого уравнения $\dfrac{\partial c_s}{\partial t}+\nu_r\dfrac{\partial c_s}{\partial r} = \dfrac{1}{r^2}\dfrac{\partial}{\partial r}(D_s r^2\dfrac{\partial c_s}{\partial r})$ численная схема рассматривается в следующем виде. Каждый член этого уравнения умножается на r^2 и интегрируется между узлами сетки. После интегрирования получаем следующее уравнение.

$$\frac{\partial c_s}{\partial t}\bigg|_{\xi}\cdot\frac{r^3}{3}\bigg|_{r_{ij}}^{r_{jk}} + \nu_r\ \frac{\partial c_s}{\partial r}\bigg|_{r=\xi}\cdot\frac{r^3}{3}\bigg|_{r_{ij}}^{r_{jk}} = D_s r^2\frac{\partial c_s}{\partial r}\bigg|_{r_{ij}}^{r_{jk}}$$

Точка ξ здесь является промежуточной точкой между двумя соседними узлами, которая появилась при интегрировании в следствии применения теоремы о среднем. Перепишем это уравнение в виде конечно-разностной схемы.

$$\frac{c_s(\xi_j,t_{i+1})-c_s(\xi_j,t_i)}{t_{i+1}-t_i}\cdot\frac{r_{jk}^3-r_{ij}^3}{3}+\nu_r\frac{c_s(\xi_{j+1},t_i)-c_s(\xi_j,t_i)}{r_{jk}-r_{ij}}\cdot\frac{r_{jk}^3-r_{ij}^3}{3}=$$

$$=D_s\left(r_{jk}^2\frac{c_s(r_{kk+1},t_i)-c_s(r_{jk,t_i})}{r_{kk+1}-r_{jk}}-r_{ij}^2\frac{c_s(r_{jk},t_i)-c_s(r_{ij,t_i})}{r_{jk}-r_{ij}}\right)$$

Здесь ξ_{j+1} — точка, расположенная между r_{jk} и следующей точкой сетки. Если положить, что при достаточно мелком разбиении точка ξ близка к $\frac{r_{ij}+r_{jk}}{2}$, перепишем полученное уравнение.

$$\frac{c_s(r_{ij},t_{i+1})+c_s(r_{jk},t_{i+1})-c_s(r_{ij},t_i)-c_s(r_{jk},t_i)}{2(t_{i+1}-t_i)}\cdot\frac{r_{jk}^3-r_{ij}^3}{3}+$$

$$+\frac{R(t_{i+1})-R(t_i)}{t_{i+1}-t_i}\frac{c_s(r_{kk+1},t_i)+c_s(r_{jk},t_i)-c_s(r_{jk},t_i)-c_s(r_{ij},t_i)}{r_{jk}-r_{ij}}\cdot\frac{r_{jk}^3-r_{ij}^3}{3}=$$

$$=D_s\left(r_{jk}^2\frac{c_s(r_{kk+1},t_i)-c_s(r_{jk,t_i})}{r_{kk+1}-r_{jk}}-r_{ij}^2\frac{c_s(r_{jk},t_i)-c_s(r_{ij,t_i})}{r_{jk}-r_{ij}}\right)$$

Уравнение баланса массы можно переписать в следующем виде:

$$\frac{4\pi}{3}\frac{R^3(t_{i+1})\rho_g(t_{i+1})-R^3(t_i)\rho_g(t_i)}{t_{i+1}-t_i}=4\pi R^2(t_i)\rho_m(t_i)\left[D_c\frac{c_c(t_i,r_j)-c_c(t_i,r_i)}{r_j-r_i}+\right.$$

$$+D_w \frac{c_w(t_i, r_j) - c_w(t_i, r_i)}{r_j - r_i}\Bigg]$$

Здесь r_i и r_j — точки, расположенные вплотную к стенке пузырька.

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.