

1 Постановка задачи

В безграничном объёме расплава на глубине около 30 км рассматривается одиночный пузырьёк 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 пузырьёк. Также, изменение температуры полагается пренебрежимо малым. Давление в окружающем расплаве предполагается постоянными, равным давлению насыщенного пара за вычетом $\Delta P \approx 1 - 10 MPa$.

В замкнутую систему уравнений входят следующие зависимости:

1) Уравнение неразрывности для расплава:

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

2) Уравнения диффузии для газов:

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

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

$$P_g - P_m = \frac{2\sigma}{R} + 4\mu_e \left(\frac{1}{R} - \frac{R^2}{S^3} \right)$$
$$S = (S_0^3 - R_0^3 + R^3)^{1/3}; \quad \mu_e = \int_R^S \frac{\mu(r, c_w)}{r^4} dr$$

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

$$\frac{4\pi}{3} \frac{d}{dt} (R^3 \rho_g) = 4\pi R^2 \rho_m [D_c \left(\frac{\partial c_c}{\partial r} \right)_{r=R} + D_w \left(\frac{\partial c_w}{\partial r} \right)_{r=R}]$$
$$D_i = D_i(c_w) - \text{известные функции}; \quad \rho_m = const$$

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, зависящими от r , выпишем его и его решение:

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

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

С граничным условием $\nu_r|_{r=R} = \dot{R}$ получаем следующее 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

$$\tilde{\mu}_e = (S - R) \int_0^1 \frac{\mu(\xi, c_w)}{(\xi(S - R) + R)^4} d\xi$$

В уравнении 4 правая часть принимает вид

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

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:

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

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 r^2 . Проинтегрируем каждое слагаемое отдельно.

$$\int_{\xi_i}^{\xi_j} \frac{\partial c_s}{\partial t} r^2 d\xi = \frac{\partial c_s(\theta)}{\partial t} \left((S-R)^2 \frac{\xi^3}{3} + 2(S-R) R \frac{\xi^2}{2} + R^2 \xi \right) \quad (1)$$

Для второго слагаемого отдельно найдём первообразную для $\kappa(\xi, t)$:

$$\begin{aligned} \int_{\xi_i}^{\xi_j} \kappa(\xi, t) d\xi &= \frac{\xi^4}{4} (S-R)^2 (\dot{R} - \dot{S}) + \frac{\xi^3}{3} [2R(S-R)(\dot{R} - \dot{S}) - \dot{R}(S-R)^2] + \\ &+ \frac{\xi^2}{2} [(\dot{R} - \dot{S})R^2 - 2R\dot{R}(S-R)] = \hat{\kappa}(\xi, t) \end{aligned}$$

Тогда для второго слагаемого имеем:

$$\int_{\xi_i}^{\xi_j} \frac{\partial c_s}{\partial \xi} \frac{1}{S-R} \frac{\kappa(\xi, t)}{r^2} d\xi = \frac{\partial c_s(\theta)}{\partial \xi} \frac{\hat{\kappa}(\xi, t)}{S-R} \quad (2)$$

Для третьего слагаемого получаем:

$$\int_{\xi_i}^{\xi_j} \frac{1}{r^2} \frac{1}{(S-R)^2} r^2 \frac{\partial}{\partial \xi} \left(D_s(c_w) r^2 \frac{\partial c_s}{\partial \xi} \right) d\xi = \frac{1}{(S-R)^2} \left(D_s(c_w) r^2 \frac{\partial c_s}{\partial \xi} \right) \quad (3)$$

Складывая эти части и вспоминая, что надо взять разности в двух точках, получим итоговое уравнение на промежутке (ξ_i, ξ_j) :

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_s(\theta)}{\partial t} \left[\left((S-R)^2 \frac{\xi^3}{3} + 2(S-R) R \frac{\xi^2}{2} + R^2 \xi \right) \right] \Big|_{\xi_i}^{\xi_j} + \frac{\partial c_s(\theta)}{\partial \xi} \left[\frac{\hat{\kappa}(\xi, t)}{S-R} \right] \Big|_{\xi_i}^{\xi_j} = \\ = \left[\frac{1}{(S-R)^2} \left(D_s(c_w) r^2 \frac{\partial c_s}{\partial \xi} \right) \right] \Big|_{\xi_i}^{\xi_j} \end{aligned}$$

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 2, из которого становятся известными концентрации газов в расплаве. Из уравнения 4 получаем плотность ρ_g . Теперь из уравнений 3 и 5 независимо получаются давления p_g . Если разница между полученными давлениями меньше, чем некоторое значение ошибки, то делается новая итерация. Когда достигается приемлимая разница, можно сделать следующий шаг по времени.