



НАУЧНАЯ СТАТЬЯ

УДК 541.12.012.2 : 539.213.3

DOI: 10.52957/2782-1919-2025-6-3-19-37

Оптимизация технологических режимов вспенивания пеностекла на основе детерминированной модели кинетики роста газовых пор с учетом многофакторных зависимостей

С.В. Федосов, М.О. Баканов, И.А. Кузнецов

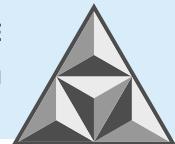
Сергей Викторович Федосов¹, Максим Олегович Баканов^{1,*}

¹Национальный исследовательский Московский государственный строительный университет, Москва,
Российская Федерация

*fedosov-academic53@mail.ru, mask-13@mail.ru**

Илья Александрович Кузнецов²

²Ивановская пожарно-спасательная академия ГПС МЧС России, Иваново, Российская Федерация
ikuz1999@list.ru



Представлена модель, реализация которой обеспечивает прогнозирование динамики роста газовых сферических полостей (пузырьков или пор) в процессе синтеза пеностекла. Она формализует взаимосвязь между физико-химическими свойствами стекольного расплава, экзогенными параметрами технологического процесса, эндогенными факторами сырьевой смеси и их воздействием на кинетику роста пузырьков. Ядром математической модели является конечно-разностная схема, реализующая численное интегрирование системы уравнений в частных производных, описывающих эволюцию системы «пузырек – расплав» во времени и пространстве. Разработанная имитационная модель функционирует как эффективный инструмент, позволяющий осуществлять вычислительные эксперименты и находить оптимальные пути совершенствования процесса вспенивания указанного строительного материала.

Ключевые слова: пеностекло, тепломассообмен, уравнение тепломассопереноса, вспенивание, рост пузырьков, модель первых принципов, конечно-разностная схема

Для цитирования:

Федосов С.В., Баканов М.О., Кузнецов И.А. Оптимизация технологических режимов вспенивания пеностекла на основе детерминированной модели кинетики роста газовых пор с учетом многофакторных зависимостей // Умные композиты в строительстве. 2025. Т. 6, вып. 3. С. 19-37.
URL: <https://comincon.ru/ru/nauka/issue/6456/view>

DOI: 10.52957/2782-1919-2025-6-3-19-37



SCIENTIFIC ARTICLE

DOI: 10.52957/2782-1919-2025-6-3-19-37

Optimization of foamed glass expansion process parameters based on a deterministic model of gas pore growth kinetics taking into account multi-factor dependencies

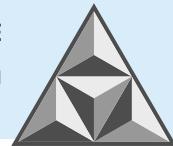
S.V. Fedosov, M.O. Bakanov, I.A. Kuznetsov

Sergey Viktorovich Fedosov¹, Maksim Olegovich Bakanov^{1,*},

¹National Research Moscow State University of Civil Engineering, Moscow, Russia
*fedorov-academic53@mail.ru, mask-13@mail.ru**

Ilya Aleksandrovich Kuznetsov²

²Ivanovo Fire and Rescue Academy of the State Fire Service of the Ministry of Emergency Situations of Russia,
Ivanovo, Russia
ikuz1999@list.ru



The paper presents a model whose implementation enables the prediction of the growth dynamics of spherical gas cavities (pores/bubbles) during the foamed glass synthesis process. The model formalizes the interrelationship between the physicochemical properties of the glass melt, exogenous parameters of the technological process, endogenous factors of the raw material mixture, and their combined impact on bubble growth kinetics. The core of the mathematical model is a finite-difference scheme that performs numerical integration of a system of partial differential equations describing the spatiotemporal evolution of the “bubble-melt” system. The developed simulation model serves as an effective tool for conducting computational experiments and identifying optimal pathways for improving the foaming process of this construction material.

Keywords: foamed glass, heat and mass transfer, heat and mass transfer equation, foaming, bubble growth, first-principles model, finite-difference scheme

For citation:

Fedorov S.V., Bakanov M.O., Kuznetsov I.A. Optimization of foamed glass expansion process parameters based on a deterministic model of gas pore growth kinetics taking into account multi-factor dependencies // *Smart Composite in Construction*. 2025. Vol. 6, Iss. 3. P. 19-37.
URL: <https://comincon.ru/ru/nauka/issue/6456/view>

DOI: 10.52957/2782-1919-2025-6-3-19-37



ВВЕДЕНИЕ

Стекольная промышленность функционирует как критически важная подсистема в глобальном промышленном комплексе, производит дифференцированную номенклатуру продукции, значимость которой охватывает широкий спектр смежных отраслевых систем. Ассортимент включает как низкотехнологичные сегменты – изделия, основанные на базовых эксплуатационно-технических свойствах стекла как аморфного конструкционного материала (например, стеклянная тара и декоративные элементы), так и высокотехнологичные сегменты, где изделия эксплуатируются благодаря управлению сложными физическими явлениями в стекле – распространением электромагнитных волн, фотонными эффектами, высокоточными оптическими характеристиками, что находит применение в волоконно-оптических световодах, оптоэлектронных компонентах и устройствах.

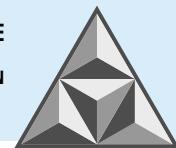
Физико-химические процессы, протекающие в ходе выплавки стекольного расплава, обладают высокой степенью нелинейности и взаимосвязанности, при этом процессы тепломассопереноса являются критически значимыми для динамики системы [1-3]. Параметризация модели требует учета не только физических условий (температурный режим, гранулометрический состав шихты), но и химико-термодинамических свойств материала. Химический потенциал кислорода (степень окисленности системы) и концентрации поливалентных ионов детерминируют кинетику газовыделения внутри пузырьков, что, в свою очередь, контролирует их рост.

Для анализа влияния множества независимых переменных (вязкость расплава; поверхностная энергия на границе раздела фаз; ионный состав расплава; экзогенные параметры процесса – начальный радиус зародышей пузырьков, градиент температуры во времени) на время роста пузырьков в пеностекле необходимо использовать универсальную детерминированную вычислительную модель.

В работе представлена модель для количественной оценки временной динамики пузырьков в пеностекле как функции от физических, химических и технологических переменных. Она служит универсальным вычислительным инструментом для оптимизации режимных параметров процесса вспенивания в системе производства пеностекла.

В рамках разрабатываемой модели пенообразования базовой вычислительной схемой служит подход, предложенный Арефманешем и Адвани [4]. Основанием является структурное допущение редуцированной геометрии: рассматривается изолированная сферическая полость (пузырек) с заданным начальным радиусом, обособленная конечным объемом стекольного расплава. Данное граничное условие представляет существенное упрощение реальной трехмерной системы, позволяя редуцировать пространственную размерность задачи до одномерной постановки в сферических координатах.

Ключевым аспектом моделирования динамики роста пузырьков является учет обратного влияния расширяющейся газовой фазы на процессы переноса в окружающей стеклянной матрице, а именно эволюция профилей концентрации диффундирующих компонентов (поливалентных ионов) в ограниченной стеклянной оболочке [5, 6]. При сферической симметрии системы и условии сохранения массы стекольного расплава (принятие постоянного объема матрицы) радиальное расширение пузырька детерминирует уменьшение толщины стеклянной оболочки. Рассмотренное прогрессирующее сжатие оболочки вызывает адиабатическое уменьшение профилей концентрации диффундирующих веществ, что существенно увеличивает локальные градиенты концентрации и, как следствие, молярную плотность потока этих компонентов согласно закону Фика [5, 6].



Динамика изолированной сферической газовой полости (пузырька) в условиях диффузионно-ограниченного роста или сжатия в бесконечной изотропной жидкой среде представляет собой классический исследовательский подход в физико-химической гидродинамике. Асимптотические аналитические решения для описания переходного изменения радиуса поры были подтверждены в ряде исследований. Так, Эпштейн и Плесет [7] разработали модель, учитывающую капиллярные силы (поверхностное натяжение), но пренебрегавшую эффектом подвижной границы раздела фаз, что исключало конвективный перенос из уравнения диффузии (квазистационарное приближение). Риди и Купер [8] сформулировали систему связанных нестационарных дифференциальных уравнений для растворения и роста сферических включений в бесконечной сплошной среде, учитывающую движение жидкой фазы. Однако эта методология игнорировала производную по времени в уравнении нестационарного массопереноса, заменяя ее аппроксимированным решением. Погрешность данного упрощения, приводящая к существенным отклонениям в прогнозировании кинетики пузырьков, была количественно оценена Кейблом и Эвансом [9], а также Дудой и Врентасом [10], выполнившими прямую численную верификацию уравнений [8]. Аналитические аппроксимации для временной зависимости радиуса также представлены Субраманьяном [11] с соавторами и Вайнбергом [12], с последующим сравнением с конечно-разностной схемой. Детальный анализ роли капиллярных сил провел Вайнберг [13], установивший замедляющее влияние поверхностного натяжения на скорость роста пузыря. Комплексное численное исследование диссипативных эффектов (вязкости), капиллярности, конвективного переноса и инерции в бесконечной среде провел Секели [14], выявивший доминирующую роль вязкости и незначительное влияние капиллярности вне начальной стадии процесса.

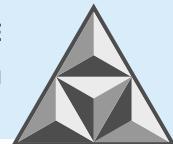
Асимптотические решения для частных случаев роста в бесконечной среде демонстрируют удовлетворительную сходимость с результатами конечно-разностных схем, принимаемых за эталонные. Однако в контексте технологической системы производства пеностекла начальные условия вспенивания (нанометровые пузырьки, низкотемпературный режим, высокая реология расплава) определяют необходимость одновременного учета капиллярных и вязкостных эффектов в разрабатываемой модели. Корректная параметризация эффекта подвижной границы фаз («движущаяся сфера»), капиллярности и диссипации требует применения численных методов решения системы уравнений роста, интегрированной с массопереносом в стекольном расплаве, с целью получения точного решения.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

Основные уравнения для модели роста пузырьков в стекольном расплаве

Математическая параметризация модели представлена в виде связанной системы дифференциальных уравнений. В ее вычислительном ядре содержится уравнение в частных производных параболического типа, описывающее поведение каждого диффундирующего компонента системы — поливалентных ионов и молекулярного (физически растворенного) кислорода. Это уравнение дополняется начальными условиями Коши и граничными условиями Дирихле или Неймана, что соответствует физике массопереноса.

Кроме того, модель включает три нелинейные обыкновенные дифференциальные уравнения, описывающие молярный поток кислорода через границу «стекло–газ», учитывающий как химически связанный кислород (в оксидах), так и физически растворенный, что отражает термодинамические и физические процессы, кинетику радиального роста



пузырька, а также экзогенный температурный режим, представляющий собой скорость нагрева, выступающую в роли управляющего параметра системы.

Концептуальная схема моделируемой физической системы (сферический пузырек в конечной оболочке стекольного расплава) представлена на рис. 1.

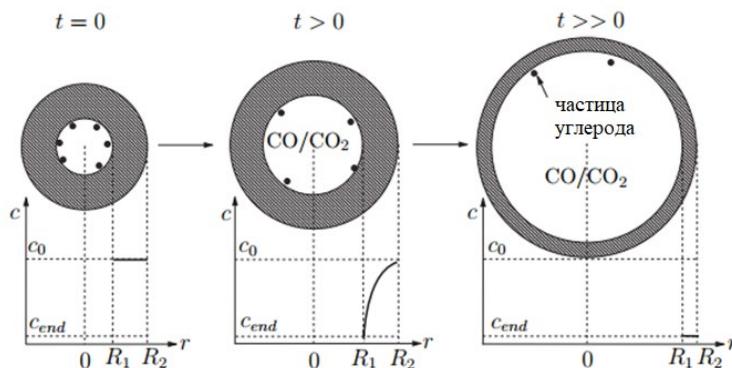
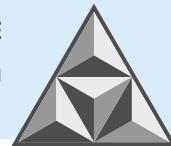


Рис. 1. Схема роста сферического пузырька в конечной оболочке стекольного расплава
(c – концентрация, R_1 – внутренний радиус, R_2 – внешний радиус, t – время)

Fig. 1. Scheme of growth of a spherical bubble in the final shell of a glass melt
(c is the concentration, R_1 is the inner radius, R_2 is the outer radius, t is the time)

Математическая формализация модели реализована в сферической системе координат с началом в центре масс пузырька. Основные допущения для математической модели:

1. Расплав стекла вокруг пузырька несжимаем, его плотность не меняется со временем и однородна во всех точках рассматриваемой расчетной области ($\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0$ и $\nabla \rho = 0$);
2. Стекло ведет себя как ньютоновская жидкость, то есть его вязкость зависит только от состояния среды (температура, давление и химический состав) и не зависит от скорости деформации или скорости вытеснения;
3. Пузырек имеет строгую сферическую симметрию системы: аннулирование тангенциальных компонент скорости ($v_0 = v_\phi = 0$) и угловых производных ($\frac{\partial}{\partial \theta} = \frac{\partial}{\partial \phi} = 0$) приводит задачу к одномерной радиальной постановке;
4. В модели рассматривается только один изолированный пузырек, окруженный сферической стеклянной оболочкой;
5. На внешней границе стеклянной оболочки при радиусе $r = R_2$ установлено граничное условие непроницаемости для газовых компонентов, выраженное в виде нулевой нормальной производной концентрации ($\left.\frac{\partial c}{\partial r}\right|_{r=R_2} = 0$) (условие Неймана). Это условие обосновано гипотезой симметрии соседних ячеек пены и отражает отсутствие молекулярного потока через границу, что соответствует специфике массопереноса;
6. В газовой фазе пузырька предполагается состояние термодинамического равновесия, при котором парциальные давления компонентов С, СО и CO_2 подчиняются закону действующих масс. Активность углерода принимается равной единице ($a_c = 1$) на основании предположения о его избытке;
7. Гравитацией пренебрегают;
8. Диффузия газообразования (СО и CO_2) в стеклянной матрице не учитывается из-за ее крайне низкой растворимости в стекле. Например, растворимость CO_2 при 1173 К составляет $7.92 \cdot 10^{-5}$ моль·м⁻³·Па⁻¹, что значительно ниже (в 10^3 – 10^5 раз) химической растворимости кислорода. Представленное существенное различие растворимости оправдывает



пренебрежение молярными потоками CO и CO₂ по закону Фика, поскольку их вклад в массоперенос через стеклянную матрицу является незначительным.

Пеностекло получают путем нагрева, например, углеродсодержащей сырьевой смеси до определенного температурного интервала, в котором происходит основное вспенивание. Вследствие этого систему рассматривают как неизотермическую. Однако для упрощения вычислительной модели принимается, что температура остается постоянной на каждом малом временном шаге, то есть в области пузырька и стеклянной оболочки отсутствует температурный градиент. Температурный режим определяется скоростью нагрева печи, в которой происходит вспенивание сырьевой смеси. В модели учитывается, что ключевые физико-химические свойства материала (вязкость, поверхностное натяжение, константы равновесия химических реакций и коэффициенты диффузии) зависят от температуры. При этом предполагается, что коэффициенты диффузии не зависят от концентрации поливалентных ионов в стеклянной оболочке и пространственного положения.

Согласно классическому уравнению неразрывности [15],

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -(\nabla \cdot \rho v), \quad (1)$$

где ρ – плотность жидкости;

t – время;

v – вектор среднемассовой скорости.

Для несжимаемой жидкости ($\rho = \text{const}$) уравнение упрощается:

$$(\nabla \cdot v) = 0 \quad (2)$$

При сферической симметрии (отсутствие угловой зависимости) и постоянной плотности стекла получаем:

$$(\nabla \cdot v) = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 v_r) = 0, \quad (3)$$

где r – радиальная координата,

v_r – радиальная компонента скорости.

Интегрируя (3) по радиусу от внутреннего радиуса пузырька R_1 до внешнего радиуса оболочки R_2 , имеем:

$$r^2 v_r = \text{const} = R_1^2 v_{R1} \Rightarrow v_r = \frac{R_1^2}{r^2} v_{R1}, \quad (4)$$

где v_{R1} – скорость роста радиуса пузырька R_1 ; $v_{R1} = \frac{dR_1}{dt}$.

С учетом ньютоновского поведения жидкости и пренебрежения гравитацией, уравнение импульса в сферической системе имеет вид [15]:

$$\rho \left[\frac{\partial v_r}{\partial t} + v_r \frac{\partial v_r}{\partial r} \right] = -\frac{\partial p}{\partial r} - \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \tau_{rr}) + \frac{\tau_{\theta\theta} + \tau_{\phi\phi}}{r}, \quad (5)$$

где p – давление;

τ_{ij} – компоненты тензора вязких напряжений.

Для ньютоновской жидкости компоненты тензора напряжений выражаются через градиенты скорости:

$$\tau_{rr} = -2\mu \frac{\partial v_r}{\partial r}, \quad (6)$$



$$\tau_{\theta\theta} = \tau_{\phi\phi} = -2\mu \frac{v_r}{r}, \quad (7)$$

где μ – динамическая вязкость.

Подставляя (6) и (7) в (5), получаем:

$$\rho \left(\frac{\partial v_r}{\partial t} + v_r \frac{\partial v_r}{\partial r} \right) = -\frac{\partial p}{\partial r} + 2\mu \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial v_r}{\partial r} \right) - \frac{2v_r}{r^2} \right]. \quad (8)$$

В условиях вспенивания стекольного расплава динамическая вязкость μ находится в диапазоне $10^{10} \div 10^4$ Па·с (температуры 873–1173 К), а число Рейнольдса (Re) крайне мало ($< 10^{-9}$). Это позволяет пренебречь инерционными членами слева в уравнении (8):

$$-\frac{\partial p}{\partial r} + 2\mu \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial v_r}{\partial r} \right) - \frac{2v_r}{r^2} \right] = 0. \quad (9)$$

Интегрирование уравнения (9) в пределах от $r = R_1$ до $r = R_2$ совместно с выражением для скорости (4) дает баланс давлений на границах стеклянной оболочки:

$$p_l(R_1) - p_l(R_2) = 0, \quad (10)$$

где $p_l(R_1)$ и $p_l(R_2)$ – давления жидкости на внутреннем и внешнем радиусах соответственно; при этом радиусы R_1 и R_2 зависят от времени.

Для учета влияния поверхностного натяжения на рост пузырька вводится дополнительный член в баланс сил на внутренней границе $r = R_1$. Иллюстрация зависимости роста поры от относительного радиуса во времени представлена на рис. 2.

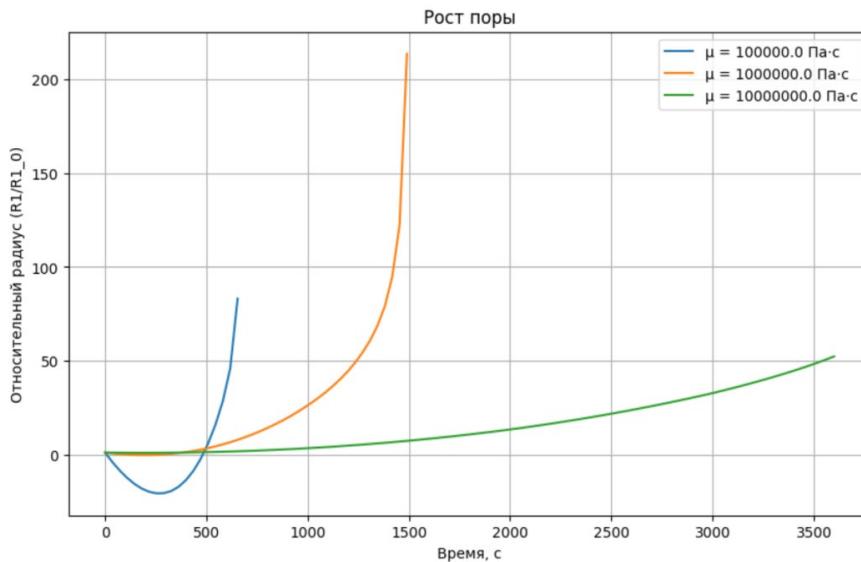


Рис. 2. Схема роста пузырьков во времени

Fig. 2. Bubble growth pattern over time

Для определения различных давлений, действующих в стеклофазе при $r = R_1$ и $r = R_2$, а также влияния поверхностного натяжения при $r = R_1$ на рост пузырька выводится баланс сил. При отсутствии внешних сил, действующих на жидкость, баланс сил может быть получен в соответствии с рис. 3.

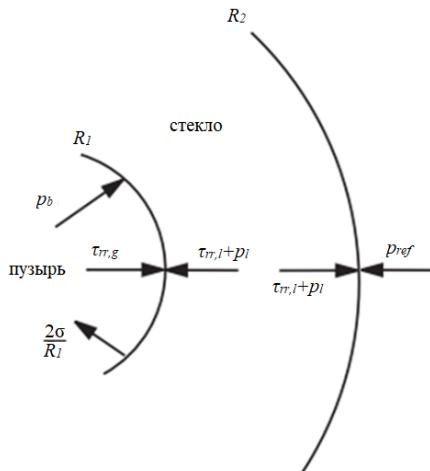
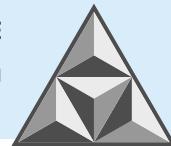


Рис. 3. Баланс сил над пузырьковой оболочкой (стрелки указывают направление силы)
Fig. 3. The balance of forces above the bubble shell (arrows indicate the direction of force)

Границные условия и баланс сил на границах пузырька

Как указано ранее (допущение 5), внешняя граница при $r = R_2$ не является реальной границей раздела, а соответствует границе стеклянной оболочки соседнего пузырька. Рассматривается единичный пузырек с его оболочкой, поэтому эталонным считается давление, приложенное ко всей системе (пузырь + стеклянная оболочка). Из-за симметрии структуры ячеек пены давление p_{ref} на границе $r = R_2$ соответствует давлению окружающего газа в процессе пенообразования.

Баланс сил на внутренней и внешней границах оболочки записывается следующим образом:

- На внутренней границе $r = R_1$:

$$p_b + \tau_{rr,g}(R_1) = p_l(R_1) + \tau_{rr,l}(R_1) + \frac{2\sigma}{R_1}. \quad (11)$$

- На внешней границе $r = R_2$:

$$p_{ref} = p_l(R_2) + \tau_{rr,l}(R_2), \quad (12)$$

где p_b – давление газа внутри пузырька;

σ – поверхностное натяжение, зависящее от температуры;

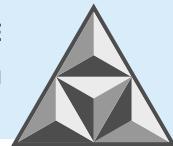
$\tau_{rr,g}$ и $\tau_{rr,l}$ – радиальные компоненты тензора вязких напряжений в газовой и жидкой фазах соответственно.

Поскольку вязкие напряжения в газовой фазе малы по сравнению с жидкой фазой, величиной $\tau_{rr,g}$ можно пренебречь. Для ньютоновской жидкости (допущение 2) компоненты $\tau_{rr,l}$ на границах связаны со скоростями роста радиусов:

$$\tau_{rr,l}(R_1) = \frac{4\mu}{R_1} \frac{dR_1}{dt}, \quad \tau_{rr,l}(R_2) = \frac{4\mu}{R_2} \frac{dR_2}{dt}. \quad (13)$$

Из уравнений баланса сил и давления следует уравнение роста пузырька:

$$p_b - p_{ref} - \frac{2\sigma}{R_1} - 4\mu \left(\frac{1}{R_1} \frac{dR_1}{dt} - \frac{1}{R_2} \frac{dR_2}{dt} \right) = 0. \quad (14)$$



Связь радиусов оболочки и несжимаемости

Объем стеклянной оболочки V_l считается постоянным (допущение 1):

$$V_l = \frac{4}{3}\pi(R_2^3 - R_1^3) = \text{const.} \quad (15)$$

Отсюда внешний радиус выражается через внутренний:

$$R_2 = \left(\frac{3V_l}{4\pi} + R_1^3\right)^{\frac{1}{3}}. \quad (16)$$

Дифференцируя по времени, получаем скорость изменения R_2 через R_1 :

$$\frac{dR_2}{dt} = \frac{R_1^2}{\left(\frac{3V_l}{4\pi} + R_1^3\right)^{\frac{2}{3}}} \frac{dR_1}{dt}. \quad (17)$$

Объединяя (16), (18) и (19), формируем уравнение роста пузырька:

$$\frac{dR_1}{dt} = \frac{\left(\frac{3V_l}{4\pi} + R_1^3\right)^{\frac{2}{3}}}{4\mu \frac{3V_l}{4\pi}} (\Delta p R_1 - 2\sigma), \quad (18)$$

где $\Delta p = p_b - p_{ref}$ – избыточное давление внутри пузырька.

Массоперенос в стеклянной оболочке

Для описания массопереноса химических компонентов i в стеклянной оболочке используется уравнение диффузии с учетом конвекции и химических реакций:

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + v_r \frac{\partial c_i}{\partial r} = D_i \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial c_i}{\partial r} \right) + \psi_i, \quad (19)$$

где c_i – концентрация компонента i ;

D_i – коэффициент взаимной диффузии, зависящий от температуры, но не от концентрации и положения;

v_r – радиальная скорость расширения оболочки;

ψ_i – источник или сток, обусловленный реакциями восстановления – окисления.

Начальные и граничные условия

- Начальные условия при $t = 0$:

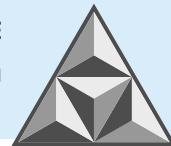
$$c_i(r, 0) = c_{i,0}, R_1(0) = R_{1,0}, R_2(0) = R_{2,0}, \frac{dR_1}{dt}(0) = 0, \psi_i = 0. \quad (20)$$

- Граничные условия:

На внутренней границе $r = R_1$ поток компонента i связан с массопереносом кислорода к газовой фазе:

$$D_i \frac{\partial c_i}{\partial r} \Big|_{r=R_1} = k_i c_{i,ox}, \quad (21)$$

где k_i – коэффициент массопереноса кислорода, а индекс ox обозначает окисленную форму поливалентного иона или физически растворенный кислород.



На внешней границе $r = R_2$ отсутствует обмен массой:

$$\left. \frac{\partial c_i}{\partial r} \right|_{r=R_2} = 0. \quad (22)$$

В модели предполагается, что коэффициент k_i достаточно велик, что отражает мгновенное потребление кислорода на границе раздела.

Давление внутри пузырька и химическое равновесие

Газ внутри пузырька образуется в результате окисления углерода до CO и CO₂. Общее давление газа в пузырьке при изотермических условиях определяется уравнением состояния идеального газа:

$$p_{b,tot} = \frac{(n_{CO_2} + n_{CO} + n_{b,0})R_g T}{V_b}, \quad (23)$$

где $n_{b,0}$ – начальное количество газов без CO и CO₂;

V_b – объем пузырька;

R_g – универсальная газовая постоянная;

T – температура.

Начальное количество газов рассчитываем по формуле:

$$n_{b,0} = \frac{p_{b,0} \frac{4}{3} \pi R_{1,0}^3}{R_g T_0}, \quad (24)$$

где $p_{b,0}$ – начальное давление, определяемое из уравнения баланса сил при отсутствии роста пузырька:

$$p_{b,0} = p_{ref} + \left. \frac{2\sigma}{R_1} \right|_{t=0}. \quad (25)$$

Константа равновесия реакции восстановления – окисления внутри пузырька задается через парциальные активности компонентов:

$$K_{p,b}(T) = \frac{a_{CO}^2}{a_{CO_2} a_C}. \quad (26)$$

Для идеальных газов активности связаны с парциальными давлениями, при этом активность углерода принимается равной единице ($a_C = 1$).

Молярный баланс кислорода между CO и CO₂ выражается:

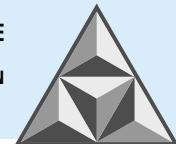
$$n'_{O_2} = n_{CO_2} + \frac{1}{2} n_{CO}. \quad (27)$$

Решение системы приводит к квадратному уравнению для количества молей CO:

$$n_{CO}^2 + \frac{K'_{p,b} V_b}{2R_g T} n_{CO} - \frac{K'_{p,b} V_b}{R_g T} n'_{O_2} = 0. \quad (28)$$

Получаем:

$$n_{CO} = -\frac{K'_{p,b} V_b}{4R_g T} + \sqrt{\left(\frac{K'_{p,b} V_b}{4R_g T} \right)^2 + \frac{K'_{p,b} V_b}{R_g T} n'_{O_2}}. \quad (28)$$



Количество n_{CO_2} определяем из уравнения (27).

На каждом временном шаге давление в пузырьке вычисляем по формуле (23) с учетом текущего радиуса R_1 .

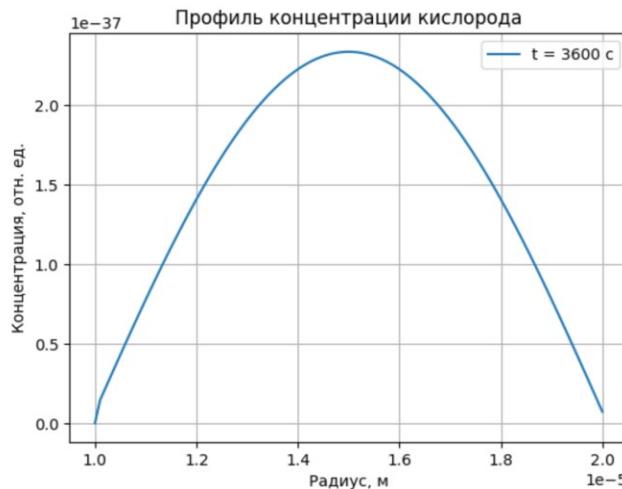


Рис. 4. Профиль концентрации кислорода

Fig. 4. Oxygen concentration profile

R_1 рассчитываем из уравнения роста (18) (см. рис. 4).

Скорость нагрева

В процессе моделирования температура в системе считается пространственно однородной на каждом временном шаге, то есть в области стеклянной оболочки и внутри пузырька отсутствуют температурные градиенты. Режим задается как функция времени с постоянной скоростью нагрева.

Температура $T(t)$ описывается следующим образом:

$$T(t) = \begin{cases} T_0 + ht, & t < t_{foam}, \\ T_{foam}, & t \geq t_{foam}, \end{cases} \quad (30)$$

где T_0 – начальная температура, при которой начинается процедура расчета;

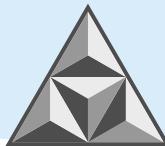
t_{foam} – время, когда достигается конечная температура всепенивания.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Описание диффузии физически растворенного кислорода и поливалентных ионов в стекольном расплаве с учетом локального термодинамического равновесия окислительно-восстановительных реакций и движения жидкой сферы не поддается аналитическому решению. Даже при упрощенной сферической геометрии уравнение диффузии остается сложным.

При постоянном объеме стеклянной оболочки V_l (допущение 1) уравнение массопереноса (21) для компонента i можно упростить.

Поскольку растущий пузырек сжимает диффузионную область ($R_2 - R_1$), которая уменьшается с каждым времененным шагом, радиусы $R_1(t)$ и $R_2(t)$ изменяются во времени. Это усложняет построение вычислительной сетки, требующей обновления на каждом шаге.



Для решения этой задачи применяется преобразование координат по Лагранжу, широко используемое в аэродинамике. Оно позволяет перейти от неподвижной системы координат r к движущейся системе с новой пространственной переменной ξ , связанной с текущими радиусами оболочки, и безразмерному времени θ . Это устраниет конвективный член из уравнения диффузии и упрощает численное решение.

Основные уравнения модели

- Уравнение роста пузырька:

$$\frac{dR_1}{dt} = \frac{\left(\frac{3V_l}{4\pi} + R_1^3\right)^{\frac{2}{3}}}{4\mu \frac{3V_l}{4\pi}} (\Delta p R_1 - 2\sigma). \quad (31)$$

- Уравнение диффузии с конвекцией и химической реакцией:

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} = D_i \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial c_i}{\partial r} \right) - \frac{R_1^2}{r^2} \frac{dR_1}{dt} \frac{\partial c_i}{\partial r} + \psi_i. \quad (32)$$

- Уравнение скорости нагрева:

$$T(t) = \begin{cases} T_0 + ht, & t < t_{foam}, \\ T_{foam}, & t \geq t_{foam}. \end{cases} \quad (33)$$

Преобразование координат по Лагранжу

Определяется безразмерная пространственная переменная ξ , связывающая радиус r с текущими границами диффузационной области:

$$\xi = \frac{r^3 - R_1^3}{(R_2^3 - R_1^3)} R_1 \leq r \leq R_2. \quad (34)$$

Объем стеклянной оболочки постоянен:

$$V_l = \frac{4}{3}\pi(R_2^3 - R_1^3) = const. \quad (35)$$

Введена константа:

$$\beta = (R_2^3 - R_1^3) = const. \quad (36)$$

Для упрощения и обобщения модели вводятся безразмерные переменные и группы:

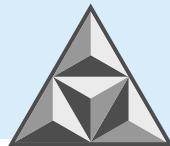
- Безразмерное время:

$$\theta = \frac{D_{ref} \cdot t}{\beta^{\frac{2}{3}}}, \quad (37)$$

где D_{ref} — эталонный коэффициент диффузии (например, для Fe^{3+} при $t = 0$).

- Безразмерная температура:

$$T^* = \frac{ht + T_0}{T_0}. \quad (38)$$



- Безразмерный радиус пузырька:

$$\xi = \frac{R_1}{\beta^{\frac{1}{3}}}. \quad (39)$$

- Безразмерные параметры, включающие вязкость и поверхностное натяжение:

$$\eta = \frac{\Delta p \beta^{\frac{2}{3}}}{\mu_0 D_{ref}}. \quad (40)$$

$$\varphi = \frac{\sigma \beta^{\frac{1}{3}}}{\mu_0 D_{ref}}, \quad (41)$$

где μ_0 и σ_0 – значения вязкости и поверхностного натяжения при $t = 0$.

В безразмерной форме уравнение (20) преобразуется к виду:

$$\frac{d\xi}{d\theta} = \frac{(1 + \xi^3)}{4z(T^*)} (\eta\xi - 2\varphi f(T^*)), \quad (42)$$

где функции $z(T^*)$ и $f(T^*)$ описывают температурную зависимость вязкости и поверхностного натяжения соответственно.

Массовый баланс кислорода на внутренней границе оболочки выражается через концентрации и диффузионные потоки:

$$\frac{\partial n^*}{\partial \theta} = \frac{9\xi^4}{c_{tot} D_{ref}} \sum_i \omega_{i,ox} D_{i,ox} z(T^*)^{-d_{i,ox}} \left. \frac{\partial c_{i,ox}}{\partial \xi} \right|_{\xi=0}, \quad (43)$$

где индексы обозначают различные окисленные формы и компоненты.

Уравнение скорости нагрева в безразмерной форме:

$$\frac{\partial T^*}{\partial \theta} = \frac{h \beta^{\frac{2}{3}}}{T_0 D_{ref}}. \quad (44)$$

При изотермических условиях и пренебрежении ростом пузырька уравнение диффузии сводится к классической задаче диффузии в сферических координатах. При больших радиусах и тонкой оболочке задача приближается к диффузии в плоской пластине, для которой известны следующие аналитические решения:

- Для малых времен (число Фурье $Fo \ll 0.1$) концентрация описывается функцией ошибок:

$$\frac{c}{c_0} = erfc \left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}} \right). \quad (45)$$

- Для больших времен:

$$\frac{c}{c_0} = exp \left(-\frac{\pi Dt}{4d^2} \right) cos \left(\frac{\pi x}{2d} \right), \quad (46)$$

где d – толщина оболочки, x – пространственная координата.

Графические результаты представлены на рис. 5-8.

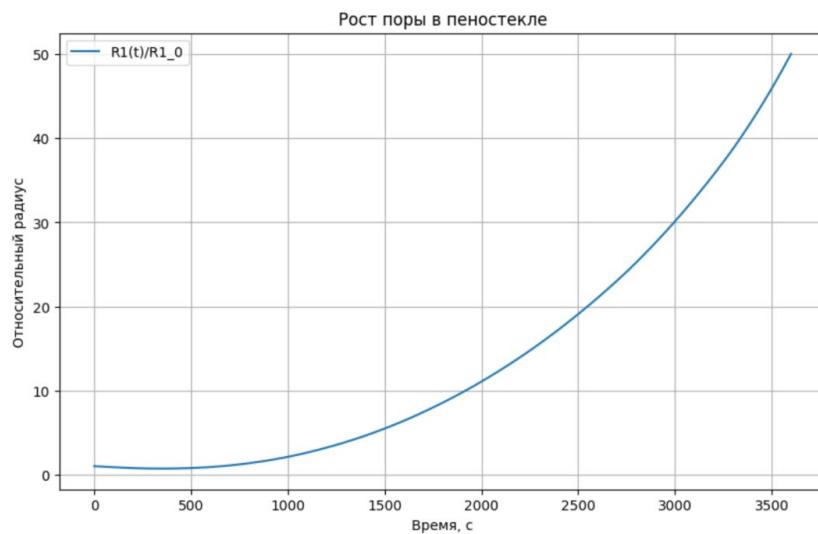
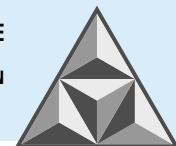


Рис. 5. Рост поры в пеностекле
Fig. 5. The growth of pores in foam glass

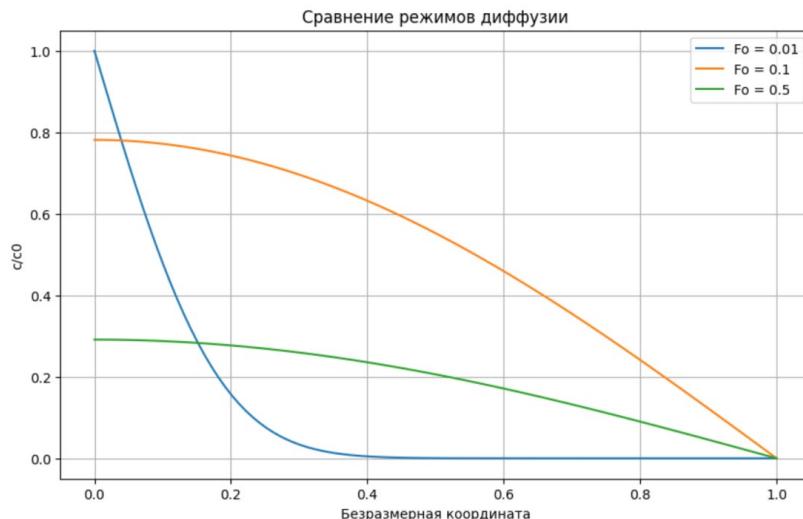


Рис. 6. Сравнение режимов диффузии для массопереноса частиц i в стекле
Fig. 6. Comparison of diffusion modes for mass transfer of I particles in glass

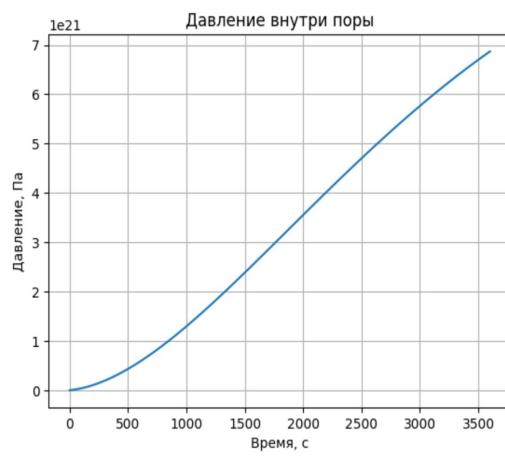


Рис. 7. Зависимость давления внутри поры во времени
Fig. 7. The dependence of pressure inside the pore over time

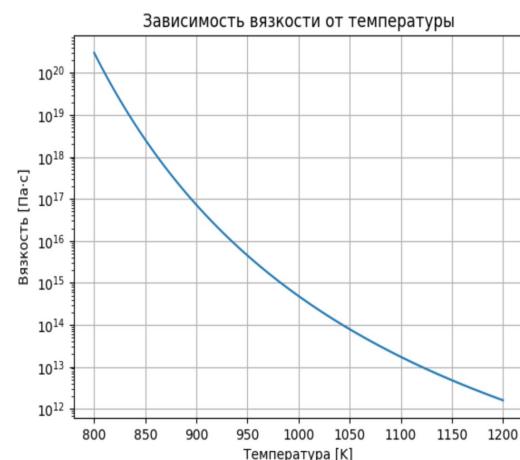
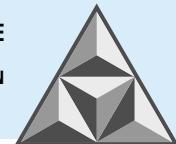


Рис. 8. График зависимости вязкости от температуры
Fig. 8. Graph of viscosity versus temperature



Отмечаем, что данная модель базируется на методологии, формализующей следующие процессы:

- диффузионный массоперенос в стеклянной матрице;
- влияние окислительно-восстановительных равновесий поливалентных ионов и физически растворенного кислорода на транспортные процессы и эволюцию концентрационных профилей.

Параметризация модели требует задания входных параметров:

- ионный состав стекла (концентрации поливалентных ионов и кислорода);
- начальный радиус зародышей пузырьков;
- начальная толщина стеклянной оболочки.

Скорость радиального роста пузырька (кинетика) определяется следующими параметрами:

- суммарная концентрация поливалентных ионов;
- степень окисленности системы;
- динамическая вязкость стекольного расплава;
- поверхностное натяжение на границе фаз, оказывающее максимальное влияние на начальной стадии при радиусе пузырька около 0.1 мм.

Верификация модели показала адекватность прогноза на ранних стадиях роста, однако выявила систематическое завышение итоговой высоты пористой структуры. Возможные системные причины расхождения включают:

- потери реакционноспособных газов через открытую пористую структуру до и во время спекания, что приводит к преждевременной инициации реакций и дефициту восстановителя после герметизации пор;
- критическая роль морфологии порообразователя: гранулометрический состав, тип восстановителя, распределение в дисперсной фазе (0.2-0.6 мас%); неоднородность распределения, вызывающая вариабельность газогенерации.

Оптимизация вязкотермического технологического окна обработки выявила следующие особенности:

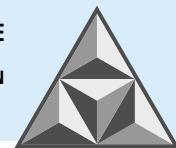
- при низких температурах спекания наблюдается неполная консолидация пор, что приводит к нарушению граничных условий;
- при высоких температурах спекания и вспенивания возникают неконтролируемая нуклеация и неоднородность оболочек, что приводит к преждевременному коллапсу пор; критическое снижение вязкости расплава способствует развитию неустойчивости Рэлея – Плато и разрушению внешнего слоя с потерями газа.

В общем и целом разработанная имитационная модель функционирует как инструмент, позволяющий находить наиболее подходящие пути совершенствования процесса вспенивания исследуемого строительного материала.

ВЫВОДЫ

Представлена детерминированная модель, описывающая кинетику роста изолированных газовых пор в дисперсной системе (спеченный стеклянный порошок с газообразователем низкой концентрации). Динамика единичных пузырьков находится в корреляции с макроскопическим расширением пористой структуры.

Анализ ключевых параметров – начального радиуса пузырьков, зависимого от гранулометрического состава порошка, и градиента нагрева – подтвердил их существенное влияние на кинетику роста пузырьков. Выбор дисперсности частиц, которая оказывает влияние на морфологию зародышей (плотность, толщина оболочки), является критическим фактором оптимизации процесса получения пеностекла.



СПИСОК ИСТОЧНИКОВ

1. **Fedosov S.V., Bakanov M.O.** Application of «micro-processes» method for modeling heat conduction and diffusion processes in canonical bodies // *ChemChemTech*. 2020. Vol. 63. No. 10. P. 90-95. DOI 10.6060/ivkkt.20206310.6275.
2. **Баканов М.О.** Моделирование высокотемпературных процессов в технологии пеностекла. Часть 1: Формирование динамики циклических нестационарных двумерных температурных полей // *Вестник Поволжского гос. технол. ун-та. Сер.: Материалы. Конструкции. Технологии*. 2021. № 2. С. 87-102. DOI 10.25686/2542-114X.2021.2.87.
3. **Fedosov S.V., Bakanov M.O., Kuznetsov I.A.** Mathematical Modeling and Experimental Investigation of the Process of Non-Stationary Heat Transfer in a Block Foam Glass Sample at the Annealing Stage // *Int. J. Comput. Civ. Struct. Eng.* 2023. Vol. 19. No. 1. P. 190-203. DOI 10.22337/2587-9618-2023-19-1-190-203.
4. **Arefmanesh A., Advani S.G.** Diffusion induced growth of a gas bubble in a viscoelastic fluid // *Rheol. Acta*, 30:274–283, 1991.
5. **Федосов С.В., Баканов М.О.** Разработка комплексного подхода к математическому моделированию процесса термической обработки пеностекольной шихты. Ч. 1. Физические представления о процессе // *Вестник Поволжского гос. технол. ун-та. Сер.: Материалы. Конструкции. Технологии*. 2017. № 2. С. 95-100.
6. **Fedosov S.V., Bakanov M.O.** Modelling of Temperature Field Distribution of the Foam Glass Batch in Terms of Thermal Treatment of Foam Glass // *Int. J. Comput. Civ. Struct. Eng.* 2017. Vol. 13. No. 3. P. 112-118.
7. **Epstein P.S., Plesset M.S.** On the stability of gas bubbles in liquid-gas solutions // *J. Chem. Phys.*, 18(11):1505-1509, 1950.
8. **Readey D.W., Cooper A.R.** Molecular diffusion with a moving boundary and spherical symmetry // *Chem. Eng. Sci.*, 21:917-922, 1966.
9. **Cable M., Evans D.J.** Spherically symmetrical diffusion-controlled growth or dissolution of a sphere // *J. Appl. Phys.*, 38(7):2899-2906, 1967.
10. **Duda J.L., Vrentas J.S.** Mathematical Analysis of bubble dissolution // *AIChE J.*, 15(3):351-356, 1969.
11. **Subramanian R.S., Chi Bo.** Bubble dissolution with chemical reaction // *Chem. Eng. Sci.*, 35:2185-2194, 1980.
12. **Weinberg M.C., Onorato P.I.K., Uhlmann D.R.** Behavior of bubbles in glass melts: I, dissolution of a stationary bubble containing a single gas. // *J. Am. Ceram Soc.*, 63(3-4):175-180, 1980.
13. **Weinberg M.C.** Surface tension effects in gas bubble dissolution and growth // *Chem. Eng. Sci.*, 36:137-141, 1981.
14. **Szekely J., Martins G.P., Fang S.D.** Bubble growth by diffusion, the effect of viscosity, inertia and surface tension // *VDI Berichte*, 182:13-22, 1972.
15. **Bird R.B., Stewart W.E., Lightfoot E.N.** Transport Phenomena. John Wiley & Sons, Inc., sec. ed., 2001.

Поступила в редакцию 01.07.2025

Одобрена после рецензирования 16.07.2025

Принята к опубликованию 24.07.2025

REFERENCES

1. **Fedosov, S.V. and Bakanov, M.O.** (2020), "Application of «micro-processes» method for modeling heat conduction and diffusion processes in canonical bodies", *ChemChemTech*, vol. 63, no. 10, pp. 90-95. DOI: 10.6060/ivkkt.20206310.6275.
2. **Bakanov, M.O.** (2021), "Modeling of high-temperature processes in foamed glass technology. Part 1: Formation of the dynamics of cyclic non-stationary two-dimensional temperature fields", *Vestnik Povolzhskogo gosudarstvennogo tekhnologicheskogo universiteta. Ser.: Materialy. Konstruktsii. Tekhnologii [Bulletin of the Volga State University of Technology. Series: Materials. Constructions. Technologies]*, no. 2, pp. 87-102. DOI: 10.25686/2542-114X.2021.2.87 (in Russian).
3. **Fedosov, S.V., Bakanov, M.O. and Kuznetsov, I.A.** (2023), "Mathematical modeling and experimental investigation of the process of non-stationary heat transfer in a block foam glass sample at the annealing stage", *Int. J. Comput. Civ. Struct. Eng.*, vol. 19, no. 1, pp. 190-203. DOI: 10.22337/2587-9618-2023-19-1-190-203.



4. **Arefmanesh, A. and Advani, S.G.** (1991), "Diffusion induced growth of a gas bubble in a viscoelastic fluid", *Rheologica Acta*, no. 30, pp. 274-283.
5. **Fedosov, S.V. and Bakanov, M.O.** (2017), "Development of a comprehensive approach to mathematical modeling of the heat treatment process of foamed glass batch". Part 1. Physical concepts of the process, *Vestnik Povolzhskogo gosudarstvennogo tekhnologicheskogo universiteta. Ser.: Materialy. Konstruktsii. Tekhnologii [Bulletin of the Volga State University of Technology. Ser.: Materials. Constructions. Technologies]*, no. 2, pp. 95-100 (in Russian).
6. **Fedosov, S.V. and Bakanov, M.O.** (2017), "Modelling of temperature field distribution of the foam glass batch in terms of thermal treatment of foam glass", *Int. J. Comput. Civ. Struct. Eng.*, vol. 13, no. 3, pp. 112-118.
7. **Epstein, P.S. and Plesset, M.S.** (1950), "On the stability of gas bubbles in liquid-gas solution", *J. Chem. Phys.*, vol. 18, no. 11, pp. 1505-1509.
8. **Readey, D.W. and Cooper, A.R.** (1966), "Molecular diffusion with a moving boundary and spherical symmetry", *Chem. Eng. Sci.*, no. 21, pp. 917-922.
9. **Cable, M. and Evans, D.J.** (1967), "Spherically symmetrical diffusion-controlled growth or dissolution of a sphere", *J. Appl. Phys.*, vol. 38, no. 7, pp. 2899-2906.
10. **Duda, J.L. and Vrentas, J.S.** (1969), "Mathematical analysis of bubble dissolution", *AIChE J.*, vol. 15, no. 3, pp. 351-356.
11. **Subramanian, R.S. and Chi, B.** (1980), "Bubble dissolution with chemical reaction", *Chem. Eng. Sci.*, no. 35, pp. 2185-2194.
12. **Weinberg, M.C., Onorato, P.I.K. and Uhlmann, D.R.** (1980), "Behavior of bubbles in glass melts: I, dissolution of a stationary bubble containing a single gas", *J. Amer. Ceram. Soc.*, vol. 63, no. 3-4, pp. 175-180.
13. **Weinberg, M.C.** (1981), "Surface tension effects in gas bubble dissolution and growth", *Chem. Eng. Sci.*, no. 36, pp. 137-141.
14. **Szekely, J., Martins, G.P. and Fang, S.D.** (1972), "Bubble growth by diffusion, the effect of viscosity, inertia and surface tension", *VDI Berichte*, no. 182, pp. 13-22.
15. **Bird, R.B., Stewart, W.E. and Lightfoot, E.N.** (2001), *Transport phenomena*. 2nd edn. New York: John Wiley & Sons, Inc.

Received 01.07.2025

Approved 16.07.2025

Accepted 24.07. 2025