



УДК 691.539.216

Белов В.В. – доктор технических наук, профессор

E-mail: vladim-bel@yandex.ru

Образцов И.В. – аспирант

E-mail: sunspire@list.ru

Тверской государственный технический университет

Адрес организации: 170026, Россия, г. Тверь, ул. Набережная А. Никитина, д. 22

Компьютерное оптимизирование зерновых составов строительных композитов на основе цементно-минеральных смесей

Аннотация

Изложены предпосылки проектирования оптимальных составов строительных смесей для получения бетонов на цементной связке, базирующиеся на закономерностях формирования полидисперсных структур, включая микро- и наноуровень. Приведен выбор методов моделирования упаковок зернистых сыпучих систем и расчета оптимальной гранулометрии сырьевых смесей с наиболее плотной упаковкой зерен, обеспечивающих оптимальные параметры уплотнения смесей.

Ключевые слова: дисперсные минеральные вяжущие системы, компьютерное моделирование упаковок, методы расчета.

Проблема оптимизации структуры и свойств строительных композиционных материалов является первоочередной задачей технологов-проектировщиков, решение которой позволяет одновременно повысить экономичность, надежность и долговечность строительных композиционных материалов. С момента начала широкого использования строительных композитов делаются попытки получения аналитических зависимостей, связывающих свойства компонентов композиционных материалов и их концентрацию в смеси со свойствами готового композита. Получение таких зависимостей позволило бы рассчитывать концентрационно-гранулометрические характеристики смесей для изготовления материалов в зависимости от требований, которым должен соответствовать готовый материал. Решение первоочередной задачи оптимизации возможно за счет синергизма многих областей научного знания, в том числе технологии строительных материалов, физики, химии, математики, программирования и др. Применение средств вычислительной техники позволяет решать многие задачи современного строительного материаловедения в области математического моделирования, прогнозирования свойств, автоматизированных расчетов и др. Появление универсальных оболочек и всё более мощных алгоритмических языков программирования дает возможность использовать компьютер как средство, позволяющее автоматизировать процесс поиска оптимальных составов композитных материалов, построить модели структуры материала в объеме, применить физические законы и спрогнозировать изменение свойств материала в зависимости от внешних условий. Компьютерные модели, построенные на основании фактора случайности, позволяют достаточно полно описать структуру композитного материала, учитывая хаотичный характер распределения структурных элементов в объеме материала, что обосновывает подход к их изучению с позиций теории вероятностей и математической статистики.

Макроструктура бетона представляет собой плотно упакованные зерна заполнителя, раздвинутые и склеенные цементным тестом. В процессе формирования макроструктуры цементное тесто первоначально обмазывает зерна заполнителя, а затем заполняет его межзерновые пустоты с равномерной раздвижкой зерен. При увеличении объема клеящего вещества каркас заполнителя становится более решетчатым – упаковка зерен становится менее плотной [1].

Если рассматривать сырьевую смесь на макроуровне, то ее можно представить как полидисперсную систему «заполнитель – вяжущая часть», в которой пространственный скелет образуют крупные зерна заполнителя, промежутки между которыми заполнены дисперсными частицами вяжущей части (рис. 1).

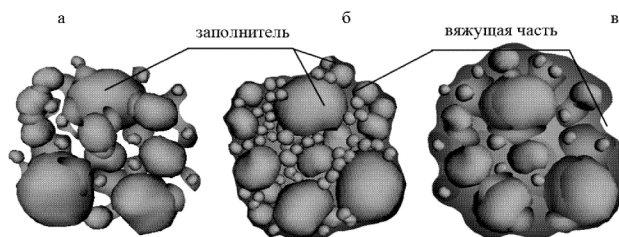


Рис. 1. Модель элементарной ячейки системы «заполнитель – вяжущая часть»:
а – недостаток вяжущей части; б – плотная упаковка заполнителя; в – избыток вяжущей части

Упаковка крупных зерен формирует определенное поровое пространство, которое в свою очередь, определяет фактическое количество частиц вяжущей части, образующей в процессе твердения контактную зону или связующую матрицу, являющуюся с позиции механической прочности слабым структурным элементом [2]. Следовательно, для достижения плотной и прочной структуры необходимо выполнение двух условий: плотная упаковка зернового скелета заполнителя и равномерное распределение связующего вещества в структуре материала, образующего прочные контакты между частицами заполнителя [3].

Принцип формирования первоначальной структуры композитов на микроуровне отличается тем, что упаковка частиц определяется не только, и не столько действием сил гравитации, а в первую очередь действием поверхностных сил между частицами. С уменьшением масштабного уровня и по мере твердения бетона процессы структурообразования приобретают химико-физический характер, что выражается в образовании новых структурных элементов и их физическом взаимодействии, например, возникновении гидроминералов и их сближении друг с другом на расстояние атомарного взаимодействия [4, 5]. В результате физико-химических процессов объем матричного материала уменьшается, что приводит к возникновению усадочных деформаций и формоизменению границ раздела системы [6].

Разработка специальных экспериментальных и расчетных методик проектирования зерновых составов полидисперсных систем с плотной упаковкой частиц чрезвычайно актуальна как с практической, так и с научной точек зрения, так как позволяет определять и обосновывать оптимальные составы цементно-минеральных смесей из условия их минимальной пустотности, как из набора реальных компонентов известной granulometрии, так и из набора определенных фракций. Распространенным подходом к исследованию полидисперсных систем является моделирование их структуры с помощью системы твердых сфер [7]. В рамках такой модели задача нахождения состава заполнителя композиционного материала, обладающего наибольшей плотностью, сводится к задаче о плотной пространственной упаковке сферических частиц [8]. Для описания наиболее плотных полидисперсных упаковок частиц в ограниченном объеме применяются известные эталонные granulометрические кривые – Фуллера, Болломея, Гуммеля, Функа-Дингера и др.

Авторами данной работы проведено сравнительное исследование плотнейших полидисперсных упаковок, рассчитанных по эталонным granulометрическим кривым. Построены компьютерные модели шаровых упаковок в ограниченном элементарном объеме (рис. 2).

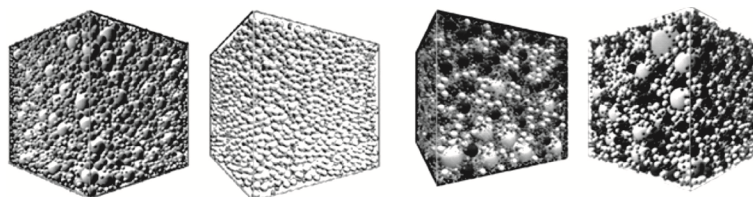


Рис. 2. Компьютерные модели плотных упаковок шаров с распределением размеров по формулам «идеальных» granulометрических кривых

С помощью компьютерного моделирования и экспериментальной проверки модельных минеральных смесей установлено, что наибольшей плотностью упаковки отличаются полидисперсные составы, рассчитанные по формулам «идеальных» гранулометрических кривых Функа-Дингера и Боломея. В уравнении Функа-Дингера (1) необходимо учитывать коэффициент формы зерен α :

$$\frac{G_{пр}}{100} = \alpha + (1 - \alpha) \frac{X^n - D_{min}^n}{D_{max}^n - D_{min}^n}, \tag{1}$$

где $G_{пр}$ – проход частиц, %, через сито размером X , мм; D_{max} – наибольшая крупность зерна в смеси, мм; D_{min} – наименьшая крупность зерна в смеси, мм; n – коэффициент распределения.

Коэффициент α в уравнении (1) оказывает особое влияние на системы с прерывистой гранулометрией. К примеру, для двухфракционных систем значение коэффициента α составляет 0,1. Расчет зернового состава двухфракционной песчаной смеси по уравнению Функа-Дингера с соблюдением данного условия соответствует экспериментально найденным соотношениям фракционного состава модельной двухфракционной песчаной смеси. Коэффициент n оказывает влияние в основном на содержание средних фракций, и на основании экспериментов можно утверждать, что более точные результаты получаются при использовании этого коэффициента, равного 0,5.

Разработана методика расчета оптимального гранулометрического состава зерновой структуры строительного композита и компьютерная программа (рис. 3), позволяющая производить расчет оптимального гранулометрического состава цементно-минеральной смеси, включающей несколько исходных компонентов.

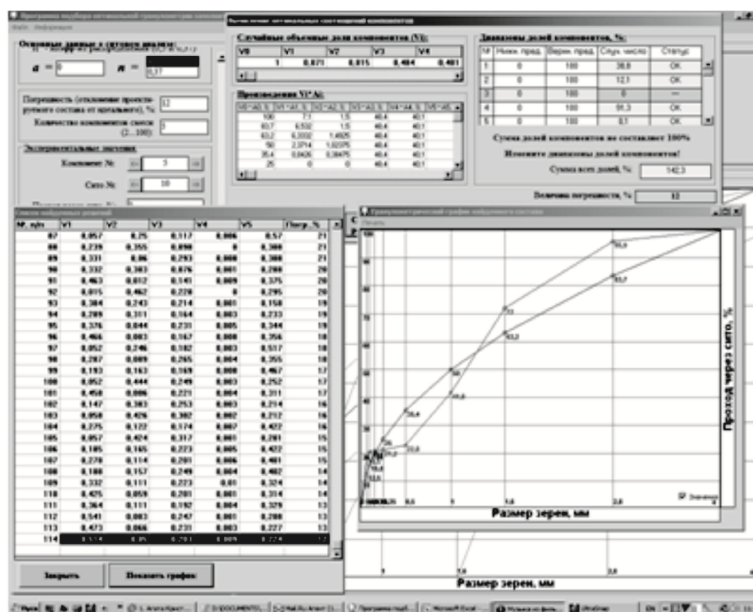


Рис. 3. Окно программы оптимизации зернового состава

В программе предусмотрена возможность автоматического поиска оптимального решения. В процессе расчета программа перебирает все возможные соотношения компонентов, последовательно уменьшая область расхождения расчетного состава с эталонным, заданным «идеальной» гранулометрической кривой. Результатом работы программы является список рассчитанных составов и величина расхождения расчетного состава с эталонным, на основании которого можно выбрать оптимальный состав, наиболее приближенный к эталону.

Вспомогательной функцией программы является возможность корректировки рассчитанного зернового состава смеси путем учета дополнительных корректирующих компонентов – «узких» фракций материала (рис. 4).

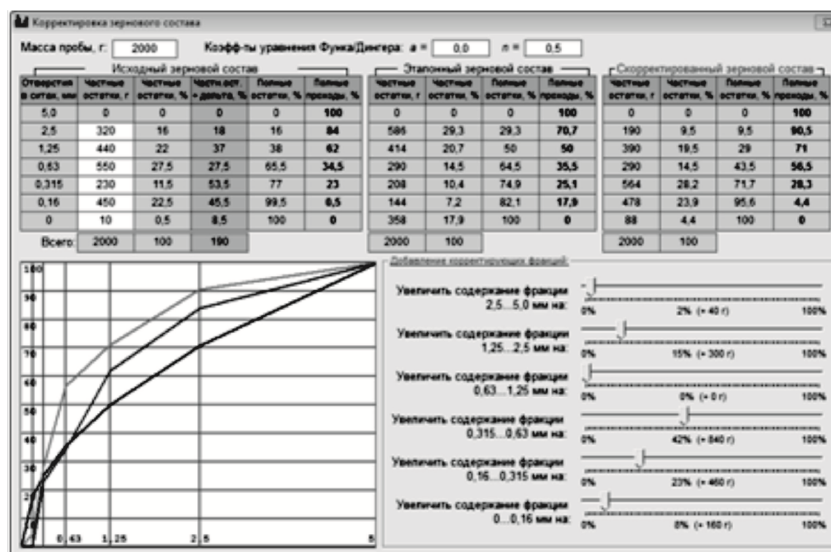


Рис. 4. Окно расчетной корректировки зернового состава

На программный продукт получено свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2010617267 «Подбор оптимальной гранулометрии заполнителя строительного композита» от 29.10.2010 г.

На основе цементно-минеральных смесей оптимального зернового состава (рис. 5), рассчитанного с помощью разработанной программно-расчетной методики, получены составы тяжелого бетона с улучшенными технико-эксплуатационными характеристиками и пониженным расходом цемента.

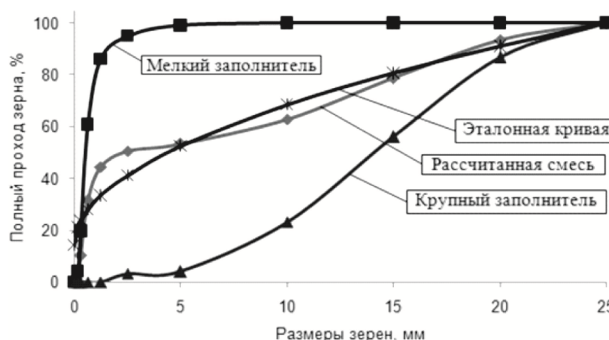


Рис. 5. Зерновые составы исходных компонентов и рассчитанной минеральной смеси

Производился подбор оптимального зернового состава заполнителей и вводился минеральный тонкомолотый компонент в вяжущую часть с целью снижения расхода вяжущего при достижении требуемых показателей контрольного состава бетона. Введение тонкомолотого известняка с удельной поверхностью $500 \text{ м}^2/\text{кг}$ в вяжущую часть сырьевой смеси позволило создать дополнительную возможность экономии цемента за счет оптимального сочетания гранулометрических характеристик минеральной добавки с гранулометрическими характеристиками цемента и достижения более плотной упаковки частиц на тонкодисперсном уровне. Были запроектированы два состава бетона заданного класса. Расчет оптимального соотношения крупного и мелкого заполнителей производился с помощью описанной выше компьютерной программы подбора оптимальной гранулометрии. Опытный состав № 1 характеризовался 10-процентным снижением расхода цемента при соответствующем увеличении расхода заполнителей с подобранным оптимальным гранулометрическим составом. Опытный состав № 2 отличался от состава № 1 тем, что в него с целью оптимизации гранулометрического состава вяжущей части на микроуровне вводилась тонкомолотая минеральная добавка

известняка в количестве 14,9 %. При этом появилась возможность дополнительного снижения расхода цемента примерно на 5 % за счет замены этого количества цемента соответствующим количеством тонкомолотой минеральной добавкой. Таким образом, общее снижение расхода цемента в составе № 2 по сравнению с заводским составом составило 15 %. В таблице приведены основные технико-эксплуатационные характеристики полученных составов бетона.

Таблица

**Технико-эксплуатационные характеристики контрольного
и экспериментальных составов бетона**

№ п/п	Класс бетона по прочности	Марка бетона по водонепроницаемости	Марка бетона по морозостойкости	ОК, см	Плотность бетонной смеси, кг/м ³	Расход цемента, кг/м ³	Возраст образцов, сут	Плотность бетона, кг/м ³	Предел прочности на сжатие, МПа
Контрольный состав	В20	W2	75	14	2 431	340	7	2 307	19,5
							28	2 313	24,3
Опытный состав № 1	В20	W2	150	14	2 446	305	7	2 280	19,3
							28	2 289	24,6
Опытный состав № 2	В20	W2	300	14	2 400	289	7	2 268	18,4
							28	2 283	24,3

Оптимизация granulometрии заполнителя бетонной смеси позволила получить более экономичный по сравнению с производственным состав бетона класса В20 (с 10-процентным снижением расхода цемента), обладающий при этом повышенной маркой по морозостойкости F150 и заданной маркой по водонепроницаемости W2. Оптимизация одновременно зерновой структуры заполнителя и вяжущей части сырьевой смеси за счет оптимальной добавки тонкомолотого известняка позволила получить еще более экономичный состав бетона класса В20 с 15-процентным снижением расхода цемента, обладающий наибольшей маркой по морозостойкости F300 и заданной маркой по водонепроницаемости W2, что значительно улучшает параметры долговечности и эксплуатационной надежности бетона, изготовленного по предлагаемым технологии и рецептуре, и при этом позволяет существенно снизить расход наиболее дефицитного и дорогостоящего компонента бетона.

Ожидаемый экономический эффект от применения составов тяжелого бетона на основе смеси заполнителей оптимального granulometрического состава и минеральной карбонатной добавки в среднем составил 12 % в стоимостном выражении из расчета сырьевых материалов на 1 м³ бетонной смеси. На основании результатов испытаний можно утверждать, что предлагаемые составы и программно-расчетную методику подбора зернового состава заполнителя можно рекомендовать для широкого внедрения в производство.

Список библиографических ссылок

1. Шумков, А.И. Формирование и оптимизация макроструктуры тяжелого бетона // Технологии бетонов, 2008, № 7. – С. 52-53.
2. Бердов Г.И., Зырянова В.Н. Пути совершенствования технологии и свойств строительных материалов // Известия вузов. Строительство, № 4, 2010. – С. 51-61.

3. Белов В.В., Смирнов М.А. Формирование оптимальной макроструктуры строительной смеси // Строительные материалы, 2009, № 9. – С. 88-90.
4. Кучеренко А.А. Порошковая технология бетона. Часть 2 // Технологии бетонов. 2009, № 1. – С. 58-60.
5. Рамачадран В., Фельдман Р., Бодуэн Дж. Наука о бетоне: Физико-химическое бетоноведение // Пер. с англ. Т.М. Розенберг, Ю.Б. Ратиновой, Под ред. В.Б. Ратинова. – М.: Стройиздат, 1986. – 278 с., ил. – Перевод изд.: Concrete science: Treatise on Current Research / V.S. Ramachandran, R.F. Feldman, Y.Y. Beaudoin / Nevden.
6. Выровой В.Н., Герега А.Н., Острая Т.В., Суханов В.Г. О некоторых особенностях описания структуры бетона как сложноорганизованного материала // Мат-лы международного конгресса Наука и инновации в строительстве SIB-2008, Том 1. Современные проблемы строительного материаловедения и технологии. Книга 1 (А-Н). – Воронеж. 2008. – С. 82-86.
7. Аникеенко А.В., Медведев Н.Н. Структурные особенности плотных упаковок твердых сфер. Критические плотности // Журнал структурной химии, 2007, Том 48, № 4. – С. 798-805.
8. Белов В.В., Образцов И.В., Реунов А.Г. Компьютерная трехмерная модель хаотичной упаковки частиц композиционного материала // Мат-лы IV Всероссийской конференции студентов, аспирантов и молодых ученых. Под общ. ред. Королева Е.В. – Пенза: ПГУАС, 2009. – С. 4.

Belov V.V. – doctor of technical sciences, professor

E-mail: vladim-bel@yandex.ru

Obraztsov I.V. – post-graduate student

E-mail: sunspire@list.ru

Tver State Technical University

The organization address: 170026, Russia, Tver, Nab. A. Nikitina st., 22

Computer optimization of grain compositions building composites based on cement-mineral mixtures

Resume

Today the construction industry consumes more resources than any other industry. The requirements for building materials are constantly growing. The principal trend is to achieve high technical and economic performance of the materials. The process makes the researches to solve several problems such as the development of a composition, formulation, processing method and many others. The rapid development of physical, physicochemical and mathematical techniques of structure, technology and material properties simulation is evident to be predicted. Composite building materials with several components of different properties are actively being developed. To get building materials with required characteristics it is necessary to evaluate such properties and know how to adjust them. The application of computer aids helps to solve many tasks of modern construction material science in mathematical modelling, property prediction, automated analysis, etc.

The article discusses the algorithm of selecting the optimal filler grain-size composition by generating random volume fractions. The method allows calculating the optimal quantitative blend composition including up to 100 source components. The program is based on the algorithm of approximating the composition being calculated to the «ideal» one described with the well-known mathematical distribution equations of Fuller, Funk-Dinger, et al. The article analyses the algorithm mathematics. The experimental data confirming the positive method effect, the strength increase in compressing carbonate filler-based fine concrete samples, are provided.

Keywords: disperse mineral binding systems, computer modelling of packings, calculation methods.

Reference list

1. Shumkov A.I. Management and optimization of heavy concrete macrostructure // *Tehnologii betonov*, 2008, № 7. – P. 52-53.
2. Berdov G.I., Zyrjanova V.N. Ways of improving the technology and properties of building materials // *Izvestija vuzov. Stroitel'stvo*, № 4, 2010. – P. 51-61.
3. Belov V.V., Smirnov M.A. Formation of optimal macrostructure mortar // *Stroitel'nye materialy*, 2009, № 9. – P. 88-90.
4. Kucherenko A.A. Powder technology of concrete. Part 2 // *Technology of concrete*, 2009, № 1. – P. 58-60.
5. Ramachadran V.S., Feldman R.F., Beaudoin Y.Y. Concrete science: Treatise on Current Research // *Hevden*.
6. Vyrovoy V.N., Gerega A.N., Ostraja T.V., Suhanov V.G. On some peculiarities of the description of the concrete structure as complex structural material // *Materials of the international congress Science and innovations in construction SIB-2008, Volume 1, Sovremennye problemy stroitel'nogo materialovedenija i tehnologii, Book 1 (A-N)*. – Voronezh, 2008. – P. 82-86.
7. Anikeenko A.V., Medvedev N.N. Structural features of dense packing of hard spheres. Critical density // *Zhurnal strukturnoj himii*, 2007, Volume 48, № 4. – P. 798-805.
8. Belov V.V., Obrazcov I.V., Reunov A.G. Computer three-dimensional model of chaotic particle packing composite // *Materials of IV All-Russian conference of students and young scientists*. Under. red. Koroleva E.V. – Penza: PGUAS, 2009. – P. 4.