

УДК 691.539.216

В.В. БЕЛОВ, д-р техн. наук, зав. кафедрой  
«Производство строительных изделий и конструкций» (vladim-bel@yandex.ru),  
И.В. ОБРАЗЦОВ, канд. техн. наук, инженер Центра электронных образовательных ресурсов (sunspire@list.ru)  
Тверской государственной технической университет (170026, г. Тверь, наб. Аф. Никитина, 22)

## Оптимальные структуры сырьевых смесей при изготовлении строительных цементных композитов

*Рассмотрены и обобщены основные закономерности формирования оптимальной зерновой структуры строительных композиционных материалов на цементной основе с минеральными наполнителями. Предложен комплексный способ компьютерной 3D-реконструкции зерновой структуры и расчета оптимальных составов сырьевых смесей, позволяющий варьировать широкий спектр параметров и оценивать производные свойства дисперсных систем, а также подбирать оптимальные гранулометрические составы смесей. Представлены экспериментальные данные исследований по достижению оптимальной структуры строительного композиционного материала.*

**Ключевые слова:** дисперсная система, структурообразование, пространственная структура, структурная топология, оптимальная гранулометрия, плотная упаковка, компьютерная реконструкция, модель.

**Для цитирования:** Белов В.В., Образцов И.В. Оптимальные структуры сырьевых смесей при изготовлении строительных цементных композитов // *Бетон и железобетон*. 2021. № 4 (606). С. 29–38.

---

V.V. BELOV, Doctor of Sciences (Engineering), Head of the Chair "Production of Building Products and Structures" (vladim-bel@yandex.ru),  
I.V. OBRAZTSOV, Candidate of Sciences (Engineering), Engineer of EScience&Learning Center  
Tver State Technical University (22, Afanasy Nikitin Embankment, Tver, 170026, Russian Federation)

### Optimal Structures of Raw Materials Mixtures When Manufacturing Construction Cement Composites

The main regularities of the formation of the optimum grain structure of construction composite materials on a cement basis with mineral fillers are considered and generalized. A complex method of 3D computer reconstruction of the grain structure and calculation of optimal compositions of raw materials mixtures is proposed, which makes it possible to vary a wide range of parameters and evaluate the derived properties of dispersed systems, as well as select optimal granulometric compositions of mixtures. Experimental data of studies on achieving the optimal structure of a building composite material are presented.

**Keywords:** disperse system, structure formation, spatial structure, structural topology, optimum granulometriya, dense packaging, computer reconstruction, model.

**For citation:** Belov V.V., Obraztsov I.V. Optimal structures of raw materials mixtures when manufacturing construction cement composites. *Beton i Zhelezobeton* [Concrete and Reinforced Concrete]. 2021. No. 4 (606), pp. 29–38. (In Russian).

---

Процесс получения высокоэффективных энерго- и ресурсосберегающих строительных материалов ставит перед исследователями ряд задач, в числе которых разработка оптимальных составов, рецептур, технологических режимов и многие другие. Особенно интенсивно разрабатываются композитные строительные материалы, сочетающие в себе несколько компонентов, обладающих различными свойствами. Для получения строительного материала с требуемыми характеристиками необходимо оценивать эти свойства и уметь их регулировать.

Сыпучий материал является средой с очень специфическими свойствами, где доминирует случайность форм и размеров частиц, физико-механических свойств и условия взаимодействия частиц друг с другом, которые вдобавок зависят от влажности материала [1]. Формирование структуры дисперсных систем

во многом обуславливает свойства композиционных материалов, получаемых на их основе. Прочность пространственной структуры дисперсной системы и ее устойчивость, характер поведения при течении, скорость разрушения и восстановления структуры непосредственно связаны друг с другом [2].

В современном материаловедении 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. Решение первоочередной задачи оптимизации возможно за счет синергизма многих областей научного знания, в том числе технологии строительных материалов, физики, химии, математики, программирования и др.

Вопросы оптимизации составов дисперсных систем широко рассматриваются многими исследователями в области строительного материаловедения [2–4]. Проявление физических явлений уплотнения (заполнения пустот) и раздвижки одних минеральных материалов другими с меньшими размерами зерен и их количественная оценка обеспечивают не только заполнение единицы объема монолитным веществом или материалом, но и формирование оптимальной макроструктуры минеральной части сыпучих смесей [5].

Существуют различные методики достижения оптимальных составов бетона и строительных смесей. Большинство методик базируются на аппроксимации зерновой структуры – представлении ее системой твердых сфер и математическом расчете гранулометрического состава [6–7]. Многие способы реализуются методами компьютерного моделирования с применением современных производительных алгоритмов: метода моделирования и аналитических расчетов, метода динамики многих тел (МКД), метода конечных элементов (МКЭ), метода гидродинамики потоков (CFD), метода дискретных элементов (DEM) и др. [8, 9].

На макроуровне структура бетона представляет собой плотно упакованные зерна заполнителя, раздвинутые и склеенные цементным тестом [9]. Если рассматривать сырьевую смесь на макроуровне, то ее можно представить как дисперсную систему «заполнитель–вяжущая часть», где пространственный скелет образуют плотно уложенные крупные зерна заполнителя, промежутки между которыми заполнены частицами вяжущей части (рис. 1).

Поровое пространство, формируемое типом укладки крупных частиц, определяет фактическое количество частиц вяжущей части, которая в процессе

твердения образует контактную зону или связующую матрицу, являющуюся с позиции механической прочности слабым элементом структуры [10]. 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.

Критерием оптимальности для грубодисперсных систем является плотность упаковки зерен. Известно, что правильный выбор зернового состава заполнителей для сырьевой смеси, обеспечивающий минимальную пустотность, или максимальную плотность упаковки зерен – один из важнейших аспектов задачи оптимизации [11]. Наибольшая плотность зерновой структуры грубодисперсной части (зерна заполнителя) строительного композита достигается за счет заполнения зернами меньших размеров пустот между крупными зернами, так называемая непрерывная гранулометрия заполнителя [3–5].

Как отмечалось выше, существует множество методов подбора оптимальной гранулометрии заполнителя. По результатам многочисленных исследований [3–5, 12] авторами выбран и реализован наиболее эффективный метод расчета гранулометрии заполнителя, базирующийся на компьютерном подборе непрерывного гранулометрического состава смеси различных по зерновым характеристикам компонентов [13, 14]. В основу метода заложен принцип генерирования компьютером случайных объемных долей смешиваемых компонентов известного зернового состава и последующая проверка приближения суммарного расчетного состава к эталонной гранулометрической кривой [15]. Метод был модернизирован дополнительно разработанным алгоритмом

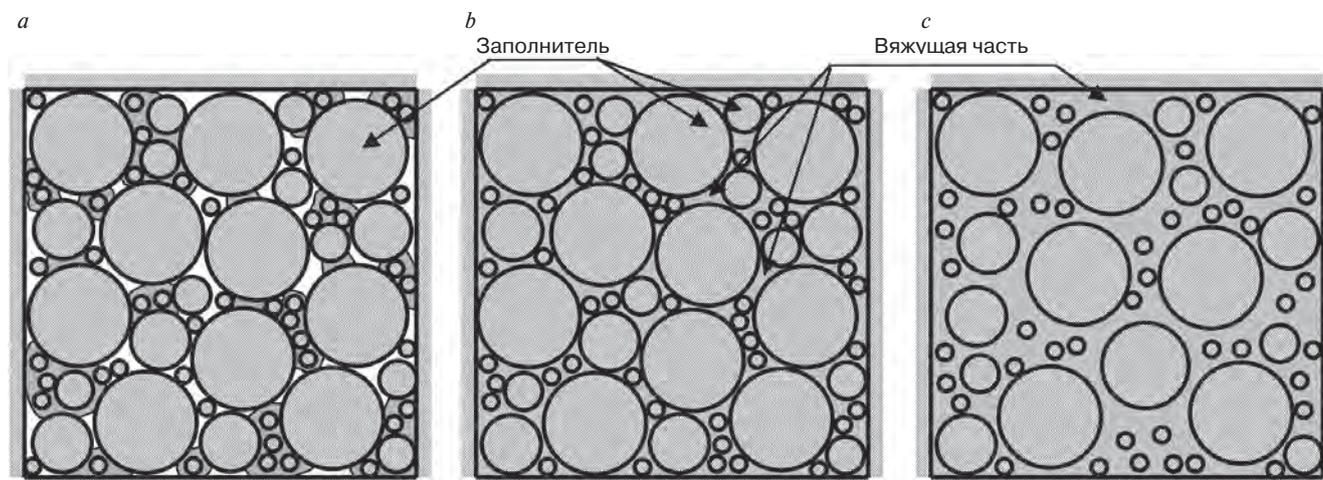


Рис. 1. Модель элементарной ячейки макроструктуры дисперсной системы «заполнитель – вяжущая часть»: а – недостаток вяжущей части; б – плотная упаковка заполнителя; с – избыток вяжущей части

Fig. 1. The model of the unit cell of the macrostructure of the dispersed system «filler-binder part»: a – lack of binding part; b – dense packing of the filler; c – excess of the binding part

автоматического поиска наилучшего решения, позволяющим уменьшать погрешность вычислений при достижении  $n$ -го числа удовлетворяющих решений, а также в математическую основу расчета было заложено модифицированное проф. В.В. Беловым [4] уравнение эталонной кривой Функа-Дингера, которое наиболее точно описывает реальную дисперсную систему с учетом наличия мелких фракций и различной формы зерен:

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

где  $G_{np}$  – проход частиц (%) через сито размером  $X$ , мм;  $D_{\max}$  – наибольшая крупность зерна в смеси, мм;  $D_{\min}$  – наименьшая крупность зерна в смеси, мм;  $n=0,5$  – коэффициент распределения;  $\alpha=1-K_{\phi}$ , для реальных частиц сыпучих систем, по данным многих исследователей, может изменяться в пределах от 0,08 до 0,14 ( $K_{\phi}$  – коэффициент формы зерен).

Коэффициент формы шара равен единице. При этом чем сильнее форма зерен отличается от идеальной сферической формы, тем большую долю в зерновом составе должна занимать меньшая фракция. Данное условие регулируется коэффициентом  $\alpha$ . 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.

На современном этапе развития строительного материаловедения возникли теория искусственных строительных конгломератов (И.А. Рыбьев) и полиструктурная теория (В.И. Соломатов). В соответствии с последней теорией композиционные строительные материалы, в частности бетоны, представляются полиструктурными, т. е. составленными из нескольких структур, переходящих одна в другую по принципу «структура в структуре». Такое разделение носит не формальный, а объективный характер и оказывает исключительно плодотворным при направленном структурообразовании, формировании свойств материала и обосновании его технологии.

Например, *макроструктуру* бетона наблюдают невооруженным глазом или при небольшом увеличении. В качестве структурных элементов здесь выделяют крупный заполнитель, песок, цементный камень, воздушные поры. Иногда удобно принимать макроструктуру, состоящую из двух элементов: крупного заполнителя и растворной части, в которой объединяются цементный камень и песок. Микроструктуру наблюдают при значительном увеличении под микроскопом. Так, изучают структуру цементного камня, которая состоит из непрореагировавших зерен цемента, дисперсных частиц наполнителя, ново-

образований и микропор разных размеров. Большое значение для свойств бетона имеет различный характер микроструктуры цементного камня в объемном (в порах между зернами заполнителя) и пленочном (на их поверхности) состояниях. В межзерновом пространстве и крупных порах чаще появляются новообразования в кристаллическом виде. В оболочке новообразований вблизи границы с поверхностью заполнителя (контактной зоне), где возможности роста кристаллов ограничены, преобладают гелеобразные субмикроструктурные продукты гидратации с повышенной связностью. Поэтому прочность цементного камня в пленочном состоянии выше, чем в объемном, и контактные зоны в бетоне имеют повышенную прочность, что благоприятно сказывается на прочности бетона в целом.

Представление композиционных строительных материалов полиструктурными позволяет поэтапно оптимизировать их структуру и свойства. Это значительно расширяет возможности исследователя: каждый структурный уровень рассматривается как новый материал с заданными качественными показателями, достижение которых является самостоятельной задачей, решаемой с привлечением индивидуальных рецептурных и технологических ресурсов (рецептурно-технологических факторов).

Количество структурных уровней зависит от рецептуры композита и опыта исследователя (технолога). В общем случае выделяют микро-, мезо- и макроструктуру. При этом предполагается, что для практической технологии и установления объективных закономерностей структурообразования и формирования свойств композита его структуру, а именно полиструктуру, достаточно рассматривать как минимум на двух характерных уровнях – уровнях микро- и макроструктуры.

Управление свойствами субмикроструктуры – на атомарном или молекулярном уровнях – в настоящее время не проработано, так как многообразие механизмов взаимодействия между атомами и молекулами имеет универсальный характер и не зависит от структурного уровня материала.

При переходе от макро- к микроструктуре строительных композитов структурная топология раскрывает признак самоподобия системы, или фрактальный характер структуры [16, 17]. Однако принцип формирования структуры на микроуровне отличается тем, что гравитационная упаковка частиц перестает быть структурообразующим фактором. Для каждого структурного уровня устанавливают показатели качества, по которым проводится оптимизация. При переходе на следующий структурный уровень (к новому материалу) оптимизированные рецептура и технология предыдущего уровня уточняются. Поэтому

последовательное совмещение уровней (от микро- до макроструктуры) требует выделения критериев (свойств), обеспечивающих получение качественного композиционного материала на уровне макроструктуры (продукта технологии).

Для топологически подобных структурных уровней, т. е. содержащих дисперсные фазы (например, цементного камня), таким критерием является подвижность смеси (цементного теста). Часто материал (композит) рассматриваемого структурного уровня, полученный из смеси с требуемой подвижностью, обладает меньшей прочностью по сравнению с композитом, структура которого оптимизирована по прочности. Однако использование подвижной смеси на последующем структурном уровне обеспечивает изготовление качественного материала, рецептура и технология приготовления которого определяются собственными показателями качества. В этом случае реализуется принцип совмещения структур, согласно которому оптимальный по выбранному показателю качества материал (структурный уровень) получают из неоптимальных по конечному показателю, но необходимых по технологическим критериям предыдущих структурных уровней.

Вязущую основу строительного композиционного материала составляет тонкодисперсная система «вязущее–микронаполнитель». Как было отмечено выше, специфика взаимодействия тонкодисперсных частиц в такой системе характеризуется преобладающими поверхностными силами [3, 18]. При переходе

размеров частиц от нескольких десятков миллиметров (крупный заполнитель) до нескольких микрометров (цемент, микронаполнитель) существует некоторый минимальный (критический) размер зерна, ниже которого происходит изменение баланса действия поверхностных и гравитационных сил. Этот размер частиц является критерием агрегируемости (возможности налипания мелких частиц на крупные с образованием агрегатов-глобул). При размере минеральных частиц меньше критического следует ожидать принципиальной невозможности плотной упаковки частиц вследствие образования арочных и мостиковых структур [3]. Учитывая поверхностное взаимодействие частиц, структуру вяжущей части сырьевой смеси можно представить с точки зрения пространственно-структурной топологии [19], разделив ее на три типа, обусловленных различными объемными соотношениями компонентов (рис. 2).

Зерновая структура на тонкодисперсном уровне представляет подобие структуры заполнителя, что, в свою очередь, ставит задачу оптимизации микроструктуры – нахождения оптимальных соотношений размеров зерен и их количественного содержания в системе.

Согласно экспериментальным данным [18], плотность минерального скелета мелкозернистого бетона повышается при условии, что отношение объемов каждой последующей фракции наполнителя к предыдущей составляет 7:3 (8:3) при диаметре частиц мелкой фракции в 8–10 раз меньше, чем крупной. Со-

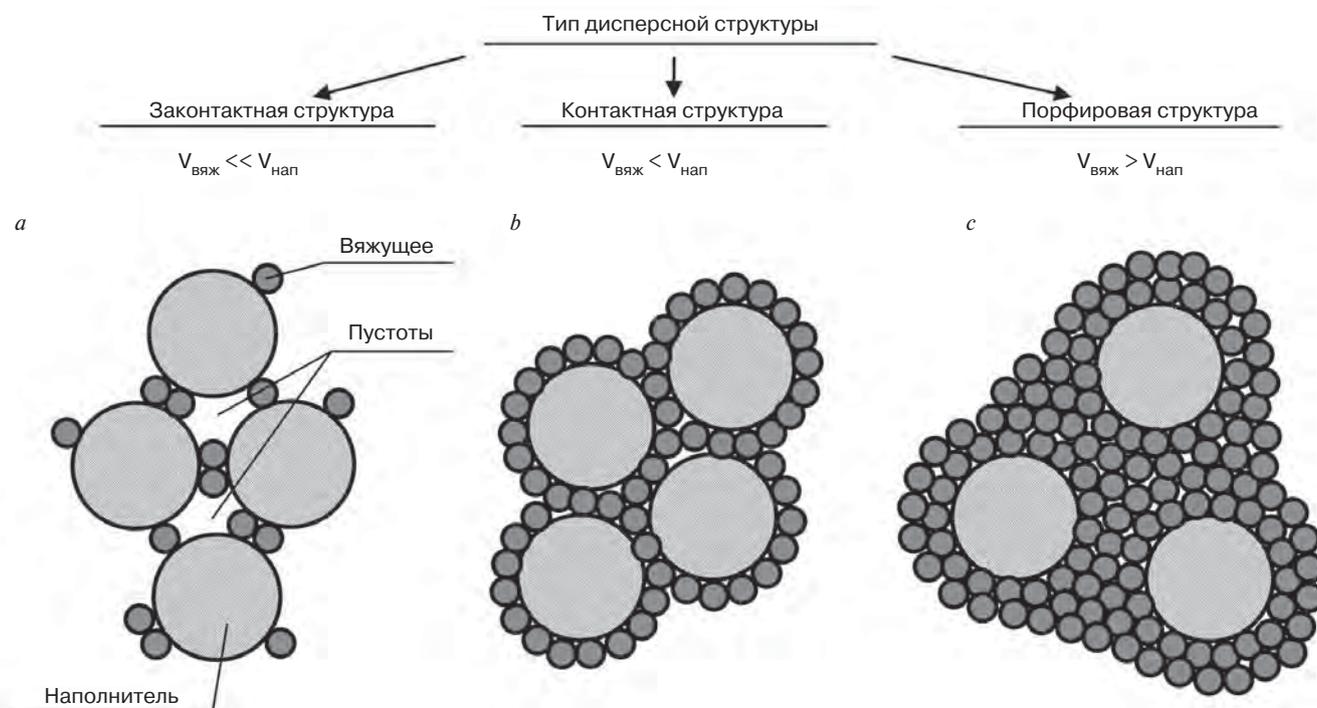


Рис. 2. Структурная топология бинарной дисперсной системы на уровне вяжущей части  
Fig.2. Structural topology of a binary dispersed system at the level of the binding part

гласно гипотезе, сформулированной авторами [20], о максимальном заполнении пустот, количество тонкокомолотых фракций песка определяется объемом пустот предыдущей фракции. В результате использование микронаполнителей (Н) трехфракционного состава ( $H_1=6-7$  мкм;  $H_2=0,6-0,7$  мкм;  $H_3=50-90$  нм) позволяет в лабораторных условиях получить бетон с прочностью при сжатии порядка 130 МПа. Важным аспектом в [17] является то, что тонкокомолотая составляющая (до 100 нм) песка начинает проявлять активность, образуя мосты, связывающие ее с цементной матрицей, а также выполнять роль дискретного армирования. Полученный мелкозернистый бетон обладает прочностью при сжатии в 3–4 раза больше обычного, что достигнуто на основании гипотезы [18] о гранулометрии, введением нанодисперсных составляющих до  $30 \text{ кг/м}^3$  или 2–3% от массы цемента.

Проф. С.П. Сивков отмечает, что небольшое (3,5–4,5 мас. %) количество карбонатного наполнителя в составе цемента положительно влияет на его свойства, при этом карбонат кальция выступает в качестве активного компонента. При более высоком содержании  $\text{CaCO}_3$  начинает выступать в качестве инертного наполнителя. При умеренном содержании  $\text{CaCO}_3$  и обеспечении необходимого гранулометрического состава (размер зерен цемента должен быть меньше, чем размер зерен кальцита) такая добавка может улучшить микроструктуру и свойства цементного камня в соответствии с теорией микробетона В.Н. Юнга. Дальнейшее увеличение количества добавки ухудшает свойства цемента за счет снижения плотности и увеличения пористости затвердевшего цементного камня [19].

Критерием оптимальности в тонкодисперсных системах выступает число контактов частиц, так на-

зываемых эффективных центров кристаллизации. Структурная топология определяет координацию ближайшего окружения частицы в трехмерном пространстве координационным числом и плотностью их упаковки в системе. Координационное число определяется количеством зерен (частиц) вокруг центрального зерна, соприкасающихся с ним. Рассмотрим топологические модели тонкодисперсной части при трех конфигурациях зерен: частицы наполнителя крупнее частиц вяжущего; частицы наполнителя сравнимы по размерам с частицами вяжущего; частицы наполнителя мельче частиц вяжущего.

На рис. 2 изображены три типа микроструктуры вяжущей части: законтрастная (а), контактная (b), порфиристая (c), обусловленные различным количественным соотношением  $V_{\text{нап}}/V_{\text{вяж}}$ . Законтрастная структура (рис. 2, а и 3, а) формируется при высоком  $V_{\text{нап}}/V_{\text{вяж}}$  при условии  $V_{\text{вяж}} \ll V_{\text{нап}}$ ; когда жесткий каркас наполнителей связан вяжущим в точечных контактах между ними, частички наполнителя не покрыты сплошной оболочкой вяжущего, а межчастичные пустоты не заполнены вяжущим. Такая структура является непрочной, характеризуется малым координационным числом и неплотной упаковкой частиц. Порфиристая структура (рис. 2, c и 3, c) формируется при условии  $V_{\text{вяж}} > V_{\text{нап}}$ , при этом  $V_{\text{нап}}/V_{\text{вяж}} < 1$ , частицы наполнителя «плавают» в вяжущем. Оптимальной с позиции экономии компонентов и плотности структуры является контактная структура (рис. 2, b и 3, b) с повышенным отношением  $V_{\text{нап}}/V_{\text{вяж}}$  при условии  $V_{\text{вяж}} < V_{\text{нап}}$ . Частички наполнителя создают жесткий скелет, соприкасаясь между собой через тонкий слой вяжущего, при этом каждая частичка наполнителя покрыта слоем вяжущего, а межчастичные пустоты заполнены вяжущим [19]. Система с такой структурой является системой заполненного типа, при этом

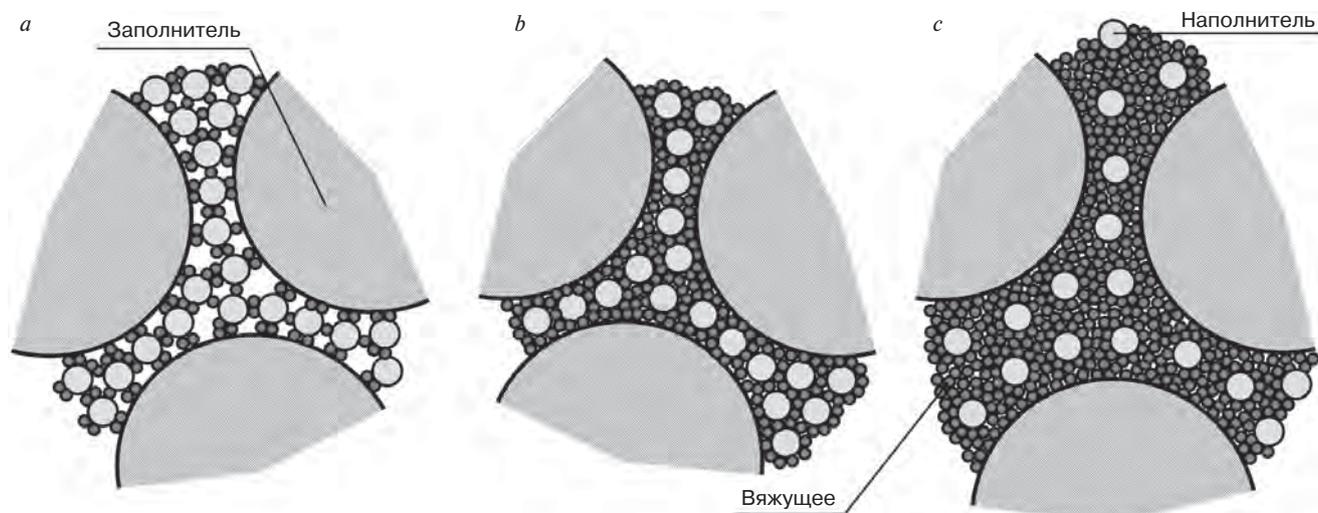


Рис. 3. Три типа структуры трехкомпонентной системы при условии, что зерна наполнителя крупнее зерен вяжущего ( $D_{\text{нап}} > D_{\text{вяж}}$ )  
 Fig. 3. Three types of structure of a three-component system, provided that the filler grains are larger than the binder grains ( $D_{\text{filler}} > D_{\text{binder}}$ )

поровое пространство между частицами заполнителя в свою очередь заполнено частицами тонкодисперсной вяжущей части. Система заполненного типа характеризуется условием  $V_{зап.зер} \ll V_{зап.пуст}$ , где  $V_{зап.зер}$  – объем заполняющих зерен;  $V_{зап.пуст}$  – объем межзерновых пустот. При этом  $V_{зап.зер} \gg V_{зап.пуст}$  система заполненного типа перейдет в систему раздвинутого типа, характеризуемую порфировой структурой.

При равенстве размеров частиц наполнителя и вяжущего ( $D_{нап} \approx D_{вяж}$ ) тонкодисперсная система становится более однородной и характер взаимодействия частиц примерно одинаков. На рис. 4 изображена топологическая модель тонкодисперсной структуры с одинаковым размером зерен вяжущего и наполнителя.

Вяжущие системы, в которых размер зерен наполнителя меньше размера зерен вяжущего ( $D_{нап} < D_{вяж}$ ), имеют несколько иную структуру. Согласно теории проф. Ю.М. Баженова [23], оптимальной конфигурацией является отсутствие возможности непосредственного взаимного контактирования частиц цемента между собой за счет расположения частиц микронаполнителя вокруг частиц цемента. Так, например, при смешивании с водой частицы цемента удалены друг от друга на расстояние, близкое к диаметру частиц микрокремнезема, что предотвращает возможность агрегирования. При таком расположении частиц микрокремнезема ускоряется процесс взаимодействия гидратной извести цемента с

близрасположенными потребителями ее, повышается микрооднородность структуры и прочность модифицированной цементной матрицы.

Если дисперсный наполнитель с суперпластификатором вводится в цемент рядового помола с  $S_{ц} = 270 \text{ м}^2/\text{кг}$ , то топология взаимного расположения частиц компонентов будет определяться количественным соотношением частиц (рис. 5).

Соотношение более крупных частиц вяжущего  $N_{ц}$  и менее крупных частиц наполнителя  $N_{н}$  можно выразить как:

$$\frac{N_{ц}}{N_{н}} = \frac{M_{ц} \cdot d_{н}^3 \cdot \rho_{н}}{M_{н} \cdot d_{ц}^3 \cdot \rho_{ц}}, \quad (2)$$

где  $M_{ц}$  и  $M_{н}$  – массовые доли частиц вяжущего и дисперсного наполнителя с оболочкой соответственно;  $d_{ц}$  и  $d_{н}$  – диаметры частиц цемента и дисперсного на-

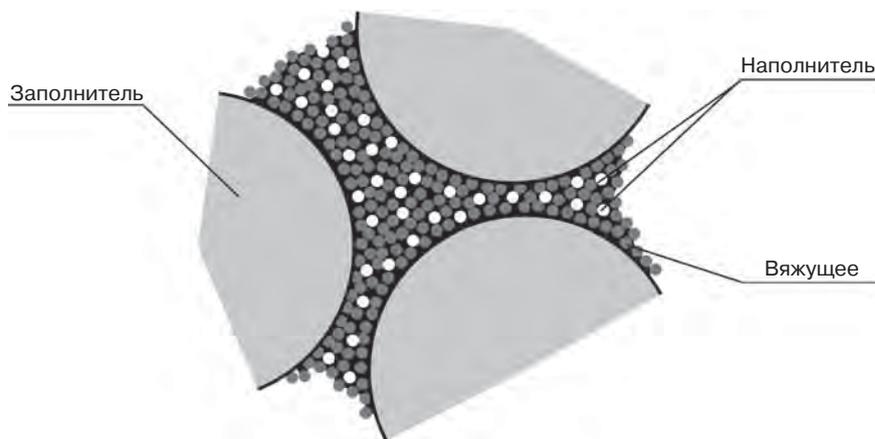


Рис. 4. Структурная топология трехкомпонентной системы при условии, что зерна наполнителя и зерна вяжущего одинакового размера ( $D_{нап} \approx D_{вяж}$ )  
 Fig. 4. The structural topology of a three-component system, provided that the filler grains and the binder grains are of the same size ( $D_{filler} \approx D_{binder}$ )

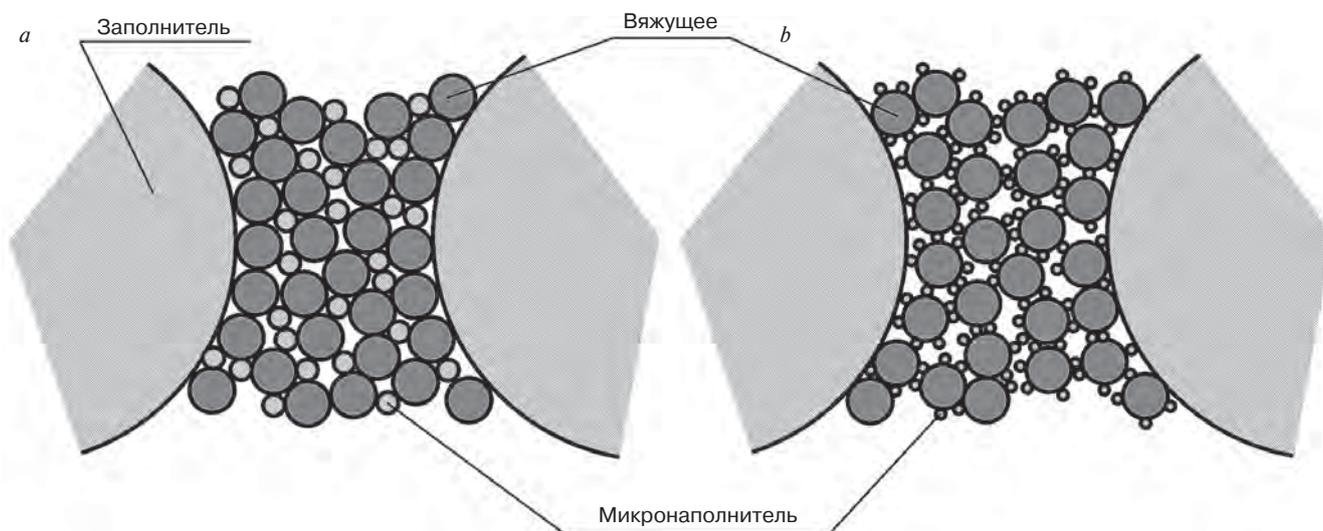


Рис. 5. Структурная топология взаимного расположения частиц цемента и дисперсного наполнителя со слоем суперпластификатора ( $D_{нап} < D_{вяж}$ ): а – дисперсность минерального наполнителя  $700 \text{ м}^2/\text{кг}$ ; б – дисперсность минерального наполнителя  $2000 \text{ м}^2/\text{кг}$   
 Fig. 5. Structural topology of the mutual arrangement of cement particles and dispersed filler with a layer of superplasticizer ( $D_{filler} < D_{binder}$ ): а – dispersion of mineral filler  $700 \text{ м}^2/\text{кг}$ ; б – dispersion of mineral filler  $2000 \text{ м}^2/\text{кг}$

полнителя с оболочкой;  $\rho_{ц}$  и  $\rho_{н}$  – истинные плотности цемента и дисперсного наполнителя.

При массовой доле дисперсного наполнителя с суперпластификатором  $M_{ц}=0,15$  ( $M_{н}=0,85$ );  $\rho_{ц}=3,1$  и  $\rho_{н}=2,6$  г/см<sup>3</sup>;  $d_{ц}=7,2$  мкм и  $d_{н}=3,4$  мкм соотношение крупных и мелких частиц составит 0,5, т. е. на одну крупную частицу цемента будет приходиться две мелкие частицы наполнителя. В топологическом размещении мелких и крупных частиц возможность контактирования частиц вяжущего между собой не полностью исключается вследствие того, что мелкие частицы дисперсного наполнителя будут преимущественно располагаться во вмещающих пустотах крупных цементных частиц. Вероятность образования локальных агрегатов из цементных частиц остается высокой.

Согласно [23], увеличение количества наполнителя выше оптимального приводит к разбавлению цементного камня наполнителем, к нарушению непосредственных контактов между гранулами клинкера и уменьшению прочности. При оптимальном количестве минерального наполнителя в бетоне структура цементного камня характеризуется оптимальным насыщением цемента наполнителем. Наглядным критерием этого состояния является достижение максимально плотной упаковки частиц в тесте, если частицы наполнителя значительно мельче частиц цемента ( $d_{ц} > d_{н}$ ), или достижение максимального насыщения цемента наполнителем без образования контактов частиц наполнителя между собой, если частицы наполнителя и цемента соизмеримы ( $d_{ц} = d_{н}$ ).

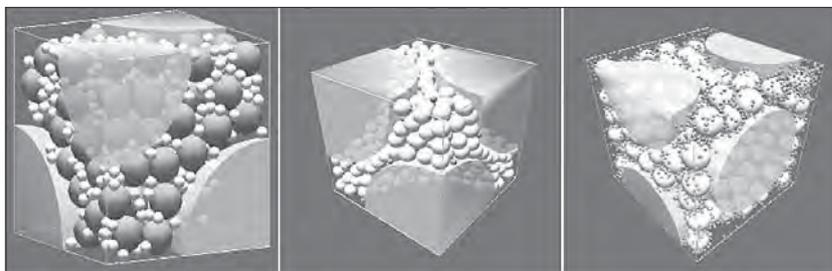
Наиболее точно оценить параметры дисперсной структуры композита на микроуровне возможно, применяя методы компьютерного моделирования, а именно трехмерную геометрическую реконструкцию в декартовой системе координат с учетом физических законов взаимодействия частиц. Для построения геометрических 3D-моделей дисперсной структуры была поставлена задача: разработать программное средство, позволяющее установить начальные параметры системы, рассчитать пространственное расположение элементов системы с учетом физических принципов взаимодействия частиц – гравитационных и поверхностных сил, а также методом суммирования столкновений элементов рассчитать фактическое количество контактов частиц при определенной степени заполнения ими элементарного объема. Для решения поставленной задачи были выбраны следующие средства разработки: среда программирования Dark Basic Professional v.1.071 (free license) с функциональным расширением Dark Physics v.1.05 (лицензионная версия:

артикул F76BJ84Q79 от 2013-01-03) и пакет разработки Microsoft Visual Basic v.6.0.

Комплект программных библиотек Dark Physics базируется на технологии NVidia PhysX – кроссплатформенном физическом движке для симуляции ряда физических явлений. В основу расчетов физики твердого тела системой PhysX заложены фундаментальные физические законы. Как и в методе дискретных элементов [7, 9], каждая твердая частица рассматривается как отдельный объект и ее движение и взаимодействие рассчитываются уравнениями Ньютона и Эйлера. Функциональные возможности данной технологии позволяют одновременно рассчитывать большое число объектов, используя ресурсы графического процессора компьютера.

С помощью вышеуказанных средств разработки авторами разработана программа трехмерного геометрического моделирования тонкодисперсной структуры строительного композиционного материала.

Принцип работы программы следующий. Создается элементарная кубическая ячейка с размером ребра  $S$ , мкм (50–100 мкм). По выбору пользователя в ячейке создается условный скелет из крупных зерен заполнителя (0, 2, 4, 6 и 8 зерен), которые формируют конфигурацию порового пространства. Пользователь назначает величину зазора между зернами макроскелета, тем самым имитируя раздвижку зерен заполнителя. Затем в элементарной ячейке создается бинарный массив сфер, имитирующий дисперсную систему «вяжущее+заполнитель» (рис. 6). Пользователь задает диаметры сфер  $D_{в}$  и  $D_{н}$ , их количества  $N_{в}$  и  $N_{н}$ , а также плотности  $\rho_{в}$  и  $\rho_{н}$ . Сферы распределяются случайным образом в пространстве макропоры. Одновременно на все сферы бинарной системы действуют физические законы – упругое соударение, гравитация и силы поверхностного притяжения. Пользователь может регулировать физические параметры – коэффициенты динамического и статического трения сфер, толщину слоя мелких частиц, притягиваемых к крупным (1–5 слоев), а также наличие сил тяжести, действующих на частицы, вычисляемых по их массам с учетом ускорения свободного падения.



**Рис. 6.** Модели заполненного порового пространства при различных соотношениях диаметров частиц

**Fig. 6.** Models of the filled pore space at different ratios of particle diameters

После сбалансирования сил, действующих на систему сфер, пользователь отключает симуляцию физики и в основном цикле программы последовательно рассчитывается количество контактов между частицами по схемам: «наполнитель–вяжущее–наполнитель», «вяжущее–вяжущее», «наполнитель–наполнитель». Все параметры модели сводятся в таблицу и сохраняются в файл, откуда передаются в программу Microsoft Excel для статистической обработки.

В процессе расчета модели программа отображает массовые и объемные доли компонентов в системе. Задавая количество сферических частиц, можно приблизительно подобрать реальные вещественные пропорции компонентов. Чтобы построить модель тонкодисперсной части строительного композита, необходимо знать плотности компонентов и их удельные поверхности.

С помощью разработанной программы рассчитаны модели бимодальной тонкодисперсной смеси цемента и молотого известняка в элементарной ячейке  $50 \times 50 \times 50$  мкм с различными соотношениями диаметров частиц, а также разными массовыми долями компонентов. При этом соблюдалось условие полного заполнения частицами элементарной ячейки в каждой конфигурации смеси. Целью расчета моделей являлось установление аналитических зависимостей между изменением среднего количества контактов частиц (координационных чисел) и изменением соотношений диаметров и массовых долей компонентов.

### Выводы

Проведенные исследования позволили получить аналитические зависимости, описывающие общие

закономерности формирования дисперсной структуры строительных цементных композитов на макро- и микроуровнях. В ходе исследований рассмотрены и обобщены наиболее эффективные методы описания процессов структурообразования, а также выбраны способы оптимизации составов строительных композитов. Разработанные математические средства подбора зернового состава и расчета геометрических характеристик зерновой структуры композита позволили смоделировать оптимальную структуру материала на основе варьирования комплекса влияющих факторов. Экспериментально получен ряд зависимостей свойств мелкозернистого бетона от рецептурных параметров. Выявлены экстремумы значений свойств бетона и установлены тренды их изменения. Экспериментальные данные об эффективном влиянии карбонатного наполнителя на свойства структуры согласуются с модельными показателями в границах применяемых соотношений компонентов системы.

Таким образом, решая задачи подбора состава бетона для различных критериев оптимальности, будь то экономия сырьевых материалов или повышение технико-эксплуатационных показателей материалов, необходимо направленно варьировать рецептурные параметры, подбирая требуемые соотношения компонентов, и согласовывать их с выходными свойствами материала. В данном исследовании методом математического моделирования установлены функциональные взаимосвязи между рецептурными параметрами и выходными свойствами бетона. Полученные данные не противоречат существующим независимым исследованиям.

### Список литературы

1. Баранцева Е.А., Мизонов В.Е., Хохлова Ю.В. Процессы смешивания сыпучих материалов: моделирование, оптимизация, расчет. Иваново: Ивановский государственный энергетический университет им. В.И. Ленина, 2008. 116 с.
2. Баженов Ю.М., Демьянова В.С., Калашников В.И. Модифицированные высококачественные бетоны. М.: АСВ, 2006. 368 с.
3. Белов В.В., Смирнов М.А. Формирование оптимальной макроструктуры строительной смеси // *Строительные материалы*. 2009. № 9. С. 88–90.
4. Белов В.В., Смирнов М.А. Теоретические основы методики оптимизации гранулометрического состава композиций для изготовления безобжиговых строительных конгломератов. *Российская академия архитектуры и строительных наук. Вестник отделения строительных наук*. Москва–Орел–Курск. 2011. С. 175–179.

### References

1. Barantseva E.A., Mizonov V.E., Khokhlova Yu.V. Protsessy smeshivaniya sypuchikh materialov: modelirovanie, optimizatsiya, raschet [Mixing processes of bulk materials: modeling, optimization, calculation]. Ivanovo: Ivanovo State Power Engineering University named after V. I. Lenin, 2008. 116 p.
2. Bazhenov Yu.M., Demyanova V.S., Kalashnikov V.I. Modifitsirovannye vysokokachestvennyye betony [Modified high-quality concretes]. Moscow: ASV, 2006. 368 p.
3. Belov V.V., Smirnov M.A. Formation of the optimal macrostructure of the building mixture. *Stroitel'nye Materialy* [Construction Materials]. 2009. No. 9, pp. 88–90. (In Russian).
4. Belov V.V., Smirnov M.A. Theoretical foundations of the methodology for optimizing the granulometric composition of compositions for the manufacture of non-firing construction conglomerates. *RAASN*.

5. Белов В.В., Смирнов М.А. Новые принципы определения состава высококачественного бетона // *Вестник Тверского государственного технического университета*. Вып. 13. 2008. С. 341–346.
6. Королев Л.В., Лупанов А.П., Придатко Ю.М. Анализ упаковки полидисперсных частиц в композитных строительных материалах // *Современные проблемы науки и образования*. 2007. № 6. С. 105–108.
7. Королев Л.В., Лупанов А.П., Придатко Ю.М. Плотная упаковка полидисперсных частиц в композитных строительных материалах // *Современные проблемы науки и образования*. 2007. № 6.
8. Слоэн Н.Дж.А. Упаковка шаров // *В мире науки. Scientific American*. 1984. № 3. С. 72–82.
9. Laurent P. Granger, Zdeněk P. Bažant, Fellow, ASCE. Effect of composition on basic creep of concrete and cement paste // *Journal Of Engineering Mechanics*. 1995. Vol. 121. Iss. 11, pp. 1261–1270.
10. Бердов Г.И., Зырянова В.Н. Пути совершенствования технологии и свойств строительных материалов // *Известия вузов. Строительство*. 2010. № 4. С. 51–61.
11. Белов В.В., Смирнов М.А. Оптимизация гранулометрического состава сырьевых смесей для получения прессованных бетонов на цементной связке // *Нанотехнологии в строительстве*. 2010. № 2. С. 7–17.
12. Образцов И.В., Белов В.В. Программно-вычислительный метод подбора зернового состава заполнителя. // *Межд. семинар-конкурс молодых ученых и аспирантов, работающих в области вяжущих веществ, бетонов и сухих смесей. Сборник докладов*. СПб.: АлитИнформ, 2011. С. 88–91.
13. Статюха Г.А., Телицына Н.Е., Суруп И.В. Оптимизация гранулометрического состава наполнителей для сухих строительных смесей // *Східноєвропейський журнал передових технологій*. 2007. № 5/3 (29). С. 23–26.
14. Воробьев В.А., Илюхин А.В., Бокарев Е.И. Кластерные структуры и теория перколяции в компьютерном материаловедении строительных композиционных материалов // *Российская академия архитектуры и строительных наук. Вестник отделения строительных наук*. 2011. Вып. 15. С. 185–189.
15. Хархардин А.Н., Ходыкин Е.И. Фрактальная размерность дисперсных и пористых материалов // *Строительные материалы*. 2007. № 8. С. 62–63.
16. Головинский П.А. Физическая релаксация и структурообразование бетона. *Материалы международного конгресса. Наука и инновации в строительстве SIB-2008. Т. 1. Современные проблемы* *Vestnik otdeleniya stroitel'nykh nauk*. Moscow-Orel-Kursk. 2011, pp. 175–179). (In Russian).
5. Belov V.V., Smirnov M.A. New principles for determining the composition of high-quality concrete. *Vestnik Tverskogo gosudarstvennogo tekhnicheskogo universiteta*. Vol. 13. 2008, pp. 341–346. (In Russian).
6. Korolev L.V., Lupanov A.P., Pridatko Yu.M. Analysis of the packaging of polydisperse particles in composite building materials. *Sovremennye problemy nauki i obrazovaniya*. 2007. No. 6, pp. 105–108. (In Russian).
7. Korolev L.V., Lupanov A.P., Pridatko Yu.M. Dense packing of polydisperse particles in composite building materials. *Sovremennye problemy nauki i obrazovaniya*. 2007. No. 6. (In Russian).
8. Sloan N.J.A. Packing of balls. *V mire nauki. Scientific American*. 1984. No. 3, pp. 72–82. (In Russian).
9. Laurent P. Granger, Zdeněk P. Bažant, Fellow, ASCE. Effect of composition on basic creep of concrete and cement paste. *Journal Of Engineering Mechanics*. 1995. Vol. 121. Iss. 11, pp. 1261–1270.
10. Berdov G.I., Zyryanov V.N. Ways to improve the technology and properties of building. *Izvestiya vuzov. Stroitel'stvo*. 2010. No. 4, pp. 51–61. (In Russian).
11. Belov V.V., Smirnov M.A. Optimization of the granulometric composition of raw mixes for obtaining pressed concretes on a cement bundle. *Nanotekhnologii v stroitel'stve*. 2010. No. 2, pp. 7–17. (In Russian).
12. Obraztsov I.V., Belov V.V. Software-computational method for selecting the grain composition of the filler. // *Interd. The seminar is a competition for young scientists and postgraduates working in the field of binders, detergents and dry mixtures. Collection of reports*. Saint Petersburg: ALITinform. 2011, pp. 88–91. (In Russian).
13. Statyukha G.A., Telitsyna N.E., Surup I.V. Optimization of the granulometric composition of fillers for dry building mixes. *Shidnoevropejs'kij zhurnal peredovih tehnologij*. 2007. No. 5/3 (29), pp. 23–26. (In Russian).
14. Vorobyev V.A., Ilyukhin A.V., Bokarev E.I. Cluster structures and percolation theory in computer materials science of building composite materials. *RAASN. Vestnik otdeleniya stroitel'nykh nauk*. 2011. Iss. 15, pp. 185–189. (In Russian).
15. Kharkhardin A.N., Khodykin E.I. Fractal dimension of dispersed and porous materials. *Stroitel'nye Materialy [Construction Materials]*. 2007. No. 8, pp. 62–63. (In Russian).
16. Golovinsky P.A. Physical relaxation and structure formation of concrete. *Materials of the International Congress. Science and Innovation in Construction SIB-2008. Vol. 1. Modern problems of construction materials science and technology*. Book 1 (A-N). Voronezh. 2008, pp. 100–112. (In Russian).

- строительного материаловедения и технологии. Кн. 1 (А–Н). Воронеж, 2008. С. 100–112.
17. Рахимов Р.З., Рахимов Н.Р. Топологические модели структуры и структурных элементов строительных композиционных материалов // *Цемент и его применение*. 2011. № 6. С. 62–65.
  18. Гусев Б.В. Исследование процессов наноструктурирования в мелкозернистых бетонах // *Нанотехнологии в строительстве*. 2009. № 3. С. 8–14.
  19. Сивков С.П. Современные тенденции в производстве цемента в РФ // *Российский ежегодник ССС*. 2011. С. 76–80.
  20. Хархардин А.Н., Топчиев А.И. Уравнения для координационного числа в неупорядоченных системах // *Успехи современного естествознания*. 2003. № 9. С. 47–53.
  21. Баженов Ю.М., Демьянова В.С., Калашников В.И. Модифицированные высококачественные бетоны. М.: АСВ, 2006. 368 с.
  22. Власов В.К. Закономерности оптимизации состава бетона с дисперсными минеральными добавками // *Бетон и железобетон*. 1993. № 4. С. 10–12.
  23. Kalala J.T., Moys M.H. Discrete element method modelling of liner wear in dry ball milling // *The Journal of The South African Institute of Mining and Metallurgy*. 2004. NOVEMBER. Pp. 597–602.
  17. Rakhimov R.Z., Rakhimov N.R. Topological models of the structure and structural elements of building composite materials. *Tsement i ego primeneniye*. 2011. No. 6, pp. 62–65. (In Russian).
  18. Gusev B.V. Investigation of nanostructuring processes in fine-grained concretes. *Nanotekhnologii v stroitel'stve*. 2009. No. 3, pp. 8–14. (In Russian).
  19. Sivkov S.P. Modern trends in cement production in the Russian Federation. *Rossiiskii ezhegodnik SSS*. 2011. pp. 76–80. (In Russian).
  20. Kharkhardin A.N., Topchiev A.I. Equations for the coordination number in disordered systems. *Uspekhi sovremennogo estestvoznaniya*. 2003. No. 9, pp. 47–53. (In Russian).
  21. Bazhenov Yu.M., Demyanova V.S., Kalashnikov V.I. *Modifitsirovannye vysokokachestvennyye betony* [Modified high-quality concretes]. Moscow: DIA, 2006. 368 p.
  22. Vlasov V.K. Regularities of optimization of the composition of concrete with dispersed mineral additives. *Beton i zhelezobeton*. 1993. No. 4, pp. 10–12. (In Russian).
  23. Kalala J.T., Moys M.H. Discrete element method modelling of liner wear in dry ball milling. *The Journal of The South African Institute of Mining and Metallurgy*. 2004. NOVEMBER, pp. 597–602.

## Не забудьте оформить подписку на второе полугодие 2021 г.



**ISSN 0005-9889**

**Подписку как на бумажную, так и на электронную версию можно оформить через редакцию.**

**Для этого необходимо прислать заявку в произвольной форме на эл. почту: [mail@rifsm.ru](mailto:mail@rifsm.ru)**

**В заявке надо указать название организации (для выставления счета), юридический и почтовый адреса, телефон и контактное лицо.**

На почте подписку можно оформить:



по объединенному каталогу «Пресса России»

индекс **85502**