

# МОДЕЛЬ СТРУКТУРЫ БЕТОНА С ТРАНЗИТНЫМИ ЗОНАМИ ПЕРЕМЕННОЙ ПРОНИЦАЕМОСТИ

Дивинец А. А., Разумейчик В. С., Дереченник С. С.

Кафедра ЭВМ и системы, Брестский государственный технический университет  
Брест, Республика Беларусь

E-mail: alexdivinets@gmail.com, vita\_r@tut.by, stanislav.derechennik@gmail.com

*Существующие сегодня методы исследования цементных материалов в большинстве своем базируются исключительно на эмпирических данных и не позволяют в должной мере оценить влияние структурных параметров на свойства материала. Применительно к задаче определения толщины транзитной зоны и ее роли в структуре бетона вычислительные эксперименты с использованием компьютерной модели более эффективны. Для оптимизации состава бетонной смеси предлагается способ моделирования, при котором задача сводится к исследованию континуальной перколяции сфер с частично перекрывающимися оболочками, в общем случае переменной толщины. Это позволит решить задачу проницаемости по транзитным зонам как с позиции их конфигурационной связности (зависящей от количества и гранулометрического состава заполнителя), так и с позиции перколяционных свойств транзитной зоны.*

## I. АКТУАЛЬНОСТЬ ИССЛЕДОВАНИЙ

При прогнозировании прочности и долговечности бетона особое внимание уделяется изучению приконтактной зоны, возникающей в области контакта цементного камня с поверхностью заполнителя. Такая зона, называемая чаще транзитной зоной, рассматривается как отдельный компонент в макроструктуре бетона, поскольку обладает свойствами, сильно отличающимися от аналогичных свойств однородного цементного камня, в первую очередь, более высокой пористостью. Существующие на сегодняшний день предложения по назначению оптимального состава бетонной смеси, основанные главным образом на минимизации пустотности между зернами заполнителя, могут привести к нежелательной ситуации – «слишком плотной» упаковке частиц заполнителя и, как следствие, «слишком частом» пересечении неоднородных транзитных зон, особенно при высоких значениях их толщины. Вот почему оптимизацию состава бетона необходимо осуществлять с учетом параметров транзитной зоны, и изменяемым в процессе гидратации их характером.

Компьютерное моделирование, как способ анализа материала, в настоящее время считается самым удобным и универсальным методом для изучения свойств и определения необходимого состава широкого ряда композиционных материалов, в т. ч. бетона. Подбор оптимального состава бетонной смеси целесообразнее осуществлять на базе проведения вычислительных экспериментов, нежели путем исключительно экспериментального смешивания компонентов в бетоносмесительных установках, поскольку позволит существенно снизить материальные и временные затраты на создание натуральных образцов.

## II. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Весьма существенная особенность структуры бетона как композиционного материала – ее

иерархичность, предопределяющая возможность применения единой концепции для моделирования структуры на различных масштабных уровнях. На каждом масштабном уровне моделируемую систему можно рассматривать как дисперсную. Так, на макроразмерном уровне исследования, структуру бетона можно представить в виде сферических частиц заполнителя (крупного и мелкого), случайным образом размещенных в непрерывной среде. Транзитная зона в такой модели представляется оболочками определенной толщины, окружающими каждую сферическую частицу. Общие характеристики среды и размер транзитной зоны (толщина оболочки) – характеристики цементного камня, определить которые можно, осуществив переход на микроструктурный уровень моделирования, – принимаются как входные параметры для модели макроструктурного уровня и в общем случае могут быть изменяемыми во времени (при гидратации цемента).

Задачу определением максимума однородно неупорядоченной упаковки частиц заполнителя по заданному его гранулометрическому составу можно решать двумя способами случайного размещения сферических частиц:

- без перекрытия их оболочек;
- с возможностью частичного перекрытия оболочек.

Первый способ – менее рациональный с точки зрения расхода цемента, но, очевидно, более «надежный» по прочности и непроницаемости. Кроме этого, можно задать некоторое минимальное расстояние между сферами, чтобы не только транзитные зоны не соприкасались, но и достаточное количество прочного цементного клея было между зернами заполнителя.

Более рациональным, хоть и трудоемким, является второй способ – с его помощью можно определить максимально допустимую долю пересечений транзитных зон, которая не приведет к возникновению перколяционного кластера

и существенному снижению свойств материала. Данный подход представляется весьма перспективным, а потому и выбран для реализации.

### III. КОНЦЕПЦИЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ

В выбранной постановке задача сводится к исследованию перколяции сфер в континууме. Теория перколяции имеет дело с образованием связанных объектов в неупорядоченных средах. Цепочка связанных объектов называется в теории перколяции кластером. Кластер, соединяющий две противоположные стороны системы, называется перколяционным. Наиболее характерной особенностью перколяционных процессов является существование порога протекания, ниже которого процесс ограничен конечной областью среды (существуют только кластеры конечного размера) [1]. Таким образом, порог перколяции сфер в континууме - доля заполнения модельного объема жесткими сферами, при которой вероятность возникновения перколяционного кластера равна 0,5.

В качестве исходных данных для идентификации кластерной структуры и определения перколяционных характеристик системы «заполнитель – транзитная зона – цементный камень» следует задавать матрицу размещения частиц заполнителя, толщину транзитной зоны и допустимую глубину перекрытия транзитных зон.

Стохастическая структурно-фазовая модель гидратирующей цементной системы [2], разработанная, главным образом, для однородного цементного камня, благодаря иерархической структуре бетона может быть адаптирована для перехода к макроструктурному уровню моделирования. Такая модель позволит синтезировать случайную (макроскопически однородную) структуру бетона по заданным ее характеристикам (гранулометрический состав и доля заполнителя), а также определить исходную толщину транзитной зоны и ее изменение в процессе гидратации цементного камня. Абстрагируясь от моделирования на микроструктурном уровне, будем задаваться различными значениями толщины  $t_{itz}$  транзитной зоны (из диапазона 35... 50 мкм) и допустимой глубины перекрытия транзитных зон (из диапазона 0...  $t_{itz}$ ) и исследовать их влияние на связность транзитных зон в структуре бетона.

Параметры, которые целесообразно предусмотреть в качестве выходных данных структурно-кластерной модели: общее количество кластеров, размер перколяционного кластера, если такой существует, а также суммарный объем пустот между зернами заполнителя, в том числе объем однородного цементного камня, общий объем транзитной зоны, включая объем транзитной зоны перколяционного кластера.

Для идентификации кластеров и оценки характеристик кластерной структуры в континуальном объеме моделируемой системы предлага-

ется воспользоваться идеями алгоритма Хошена–Копельмана, модифицированного под континуальную задачу [3]. Такой алгоритм, называемый также алгоритмом многократной маркировки кластеров, позволяет идентифицировать все кластеры и получить распределение их по размерам за один проход по матрице размещений.

После проведения серии из достаточно большого количества статистических испытаний можно определить среднее количество кластеров, вероятность возникновения перколяционного кластера, а также усредненные значения перечисленных выше выходных параметров структурно-кластерной модели. Изменяя в допустимых пределах коэффициент заполнения объема твердыми частицами, легко установить порог перколяции сфер по транзитным зонам.

Поочередно варьируя значения остальных входных параметров модели, на базе все тех же серий вычислительных экспериментов, но проводимых уже вблизи порога перколяции, можно оценить влияние такого изменения на характеристики кластерной структуры моделируемой системы. Это позволит выявить зависимость порога перколяции от толщины транзитной зоны, допустимой величины перекрытия транзитных зон, удельной площади поверхности заполнителя и других характеристик гранулометрического состава заполнителя, например, среднего радиуса частиц.

### IV. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предложенная модель континуальной перколяции сфер с частично перекрывающимися оболочками отличается от известных тем, что в ней вероятность возникновения перколяционного кластера зависит не только от доли заполнения системы частицами, но и от толщины оболочки, допустимой величины перекрытия оболочек, удельной площади поверхности дисперсной фазы, а также иных характеристик ее гранулометрического состава.

Полученные результаты позволят подобрать оптимальный гранулометрический состав заполнителя и определить его максимальную долю в бетонной смеси, которая при известных характеристиках транзитной зоны не приведет к возникновению ее перколяционной связности. Это обеспечит рациональное использование цемента и не ухудшит качество композиционного материала.

1. Федер, Е. Фракталы / Е. Федер. – М.: Мир, 1991. – 262 с.
2. Разумейчик В. С. Стохастическая структурно-фазовая модель гидратирующих цементных систем: автореферат диссертации на соискание ученой степени кандидата технических наук: 05.23.05. – Брест: БрГТУ, 2012. – 25 с.
3. Бузмакова М. М.. Перколяция сфер в континууме / М. М. Бузмакова // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Математика. Механика. Информатика. - 2012. -Т. 12, № 2. -С. 48-56.