

ОБ ИСТОКАХ КОМПЬЮТЕРНОГО БЕТОНОВЕДЕНИЯ

Кучеренко А.А. (Одесская государственная академия строительства и архитектуры)

Изложена часть материала о нанотехнологии компьютерного бетоноведения.

Необходимость разработки компьютерного материаловедения очевидна. Однако, на современном этапе эти работы можно отнести к разряду глобализма, с отсутствием какой-либо последовательности и целенаправленности хотя бы в одной отрасли строительного производства. Примером может стать экспериментально статистическое моделирование, пропагандируемое В.А. Вознесенским [1], которое действительно могло бы быть элементом компьютерного материаловедения, но не стало. И сейчас это «компьютер в материаловедении», объединивший в себе калькулятор, чертежные атрибуты и пишущую машинку. Нельзя бесконечно оптимизировать и принимать за истину результат, в состав которого входят две группы факторов: переменные и постоянные. Переменные отражены в математической модели, а постоянные нет. Вклад же постоянных факторов в результат (отклик) зачастую значительно больший, чем переменных. Но они в формуле модели не отражены и ускользают не только от технологического анализа, но от объективности оценки результата опытов. К тому же нельзя вводить в базовый состав хотя бы один новый компонент и механически, бездумно оптимизировать, не учитывая его совместимость (структурную, химическую и т.п.) с остальными компонентами. К компьютерному материаловедению статистическое моделирование приведет только учет исключительно всех составляющих строительного материала (например, бетона). А до сих пор, каким бы универсальным, обширным, с безграничными возможностями не казался, он дает столь общие закономерности, результаты которых применить сразу в дело невозможно.

Второй путь компьютерного глобализма – это тоже использование компьютера в обеспечении долговечности бетона на разные сроки. В разработках Плугина А.Н. и др.[2] долговечность бетона прогнозируется до 400 лет и оценивается по степени его выщелачивания. Химикам нельзя паразитировать на слезах (выщелачивании) бетона, а надо искать пути сохранения щелочности среды, для предотвращения коррозии арматуры за столь длительные сроки. К тому же выщелачивание идет с поверхности бетона, не отражая сути глубинных процессов.

Долговечность бетона обеспечивается прежде всего выбором качества исходного сырья (чего нет в алгоритме) и, практически на все время эксплуатации (особенно в метростроении), гидроизолирующими материалами, о чем умалчивается в работах.

В технологии бетона практически все поставлено на эмпирическую основу, потом мы ищем основу теоретическую. Даже эмпирически мы подошли к необходимости работать с бетоном на наноуровне. Как ни странно, но в настоящее время строительное материаловедение развивается как бы в обратном направлении: от макро- к микро-, нано-, фитоуровням. Представляется теоретически логичным развивать отрасль науки о создании твердого вещества (бетона), начиная хотя бы от атома, иона – к твердому веществу. И если нанотехнология предопределяет работу исследователя на уровне размеров ионов, атомов и молекул, то их надо не просто арифметически считать, но и выявлять основные функциональные особенности, совместимость (сродство) с другими компонентами, количественную и качественную роль их в создании твердого вещества (бетона).

Учитывая изложенное мы полагаем, что истоки компьютерного материаловедения заложены на уровне нанотехнологии. И потому от нее мы должны идти к макротехнологии. А чтобы уйти от глобализма, будем говорить о технологическом подходе к компьютерному бетоноведению (а не материаловедению). Есть смысл бетон (основной строительный материал) познать «изнутри»: от атома к изделию, от научного подхода к эмпирическому.

В исследованиях за основу принят системный подход на базе работ [3,4] Некоторые результаты расчетов приведены в табл.1 с соответствующим номером позиции. Последние представлены выборочно из-за сложности публикации.

Изучение системы «ЛСТ – H_2O » свидетельствует о дискретном расположении молекул лигносульфоната технического (ЛСТ) в среде воды затворения. В действительности возможна их флокуляция, перепутаница, образование клубков и т.п. Фактическая концентрация водного раствора равна 0,45, но она мало о чем говорит, так как пока нет связи его с твердыми компонентами. Но уже четко ясно, что мы имеем дело не просто с водой, а с раствором ЛСТ, т.е. модифицированной водой затворения В системе «Микрокремнезем – раствор ЛСТ» по данным [5] микрокремнезем (МК) впитает в среднем 70% раствора ЛСТ от своей массы..

Таблица 1. Теоретический расчет материального баланса между водой, добавками и заполнителем из расчета их расхода на 1 м³ бетона

№поз	Наименование показателей	Величины
Система «Лигносульфонат – вода затворения»		
9	Толщина водной прослойки между двумя, рядом расположенными, молекулами ЛСТ, мк	2
10	Фактическая концентрация водного раствора ЛСТ, %	0,45
Система «Микрокремнезем – раствор ЛСТ»		
14	Количество воды, поглощенное зернами МК, л	17
16	Отношение свободной воды затворения к массе цемента	0,41
20	Количество слоев Н ₂ О на одном зерне МК, шт	2052
23	Количество ЛСТ на одном зерне МК, шт	2260
25	Расстояние между двумя, рядом расположенными, зернами МК, мк	1,2
27,43	Количество воды затворения на водопотребность зерен П (Щ), л	24 (22)
Система «Заполнитель – суспензия»		
37,48	Толщина слоя Н ₂ О на каждом зерне П (Щ), мк	0,13 (143)
38,51	Толщина молекул ЛСТ, на каждом зерне П (Щ), мк	0,03 (1)
39,55	Толщина зерен МК на каждом зерне П (Щ), мк	1,1 (506)
41	Расстояние между двумя, рядом расположенными, зернами, мк: - песка	2,54
57	- песка и щебня	399
58	- щебня	794

При этом неизвестен размер пор МК и произойдет ли в них внедрение молекул ЛСТ. Не ясно также надо ли, чтобы молекулы ЛСТ поглощались, т.е. своего рода происходили потери их. Может быть он более ценен в последующем для зерен цемента (Ц). Не ясно также взаимодействие МК и ЛСТ. И надо ли, чтобы зерна МК покрывались молекулами ЛСТ, т.е. стоит ли МК вводить в состав воды затворения и сразу консервировать его. Быть может сначала воду смешивать с МК, а затем добавлять ЛСТ. Присутствие МК раствор ЛСТ превращает в суспензию. Совершенно очевидно, что вязкость суспензии будет отлична

от вязкости воды. И тем более и на этом этапе о воде затворения можно говорить только условно. И все же отношение свободной воды затворения в данной системе составляет 0,41. При этом надо отметить, что суммарная поверхность зерен МК в 4 раза больше суммарной поверхности зерен цемента. Это не может не изменить вязкость данной системы сравнительно с предыдущей. Большое количество слоев раствора ЛСТ на зернах МК также говорит о дискретном размещении последних.

Показатели системы «Заполнитель – суспензия МК» вызывает больше вопросов, чем ответов. На данном этапе речь должна идти о смачивании кварцевого песка (П) и гранитного щебня (Щ), а не о водопотребности их, как здесь принято по Ю.М.Баженову. Потому и результаты по величине толщины слоев молекул ЛСТ и зерен МК на зернах заполнителя отличны на много порядков, что крайне сомнительно. Есть ли смысл расходовать ЛСТ и МК для покрытия зерен П и Щ в количестве до сотен микрон. Хотя надо отметить, что суммарная поверхность зерен заполнителя составляет всего лишь 5% от суммарной поверхности зерен Ц и 1,6% от поверхностей суммы Ц+МК. С одной стороны, этим можно пренебречь, с другой – отдельно готовить цементное тесто с добавками МК и ЛСТ. В этой системе заполнитель поглощает 46 л суспензии. На это количество свободной воды для смешивания с зернами цемента будет меньше, т.е. уже $V/C=0,31$.

Значительные расстояния между двумя, рядом расположенными, зернами твердых компонентов свидетельствуют о преимуществе сил гравитации (тяжести) сравнительно с силами взаимного притяжения. Так, силы тяжести зерен П равны 0,02 н, а силы взаимного притяжения между зернами П и МК – $424 \cdot 10^{-20}$ н между Щ и МК – $270 \cdot 10^{-7}$ н. Это подтверждает наши теоретические предположения / [3] о роли сил гравитации в упорядочивании структуры бетона.

Система «Цемент – суспензия МК», табл. 2, показывает какое количество других составляющих бетона приходится на 470 кг цемента.

При выбранном нами методе расчета трудно сказать достаточно ли для каждого зерна Ц материалов (поз.69,70,71). Количество слоев исходного сырья на зернах Ц во много раз меньше, чем на зернах заполнителя (поз.37-39 и 44-46). Здесь принят усредненный размер зерен Ц, не вступивший в реакцию. Это стартовое состояние. Расчет пригоден только для принятой последовательности ($H_2O+ЛСТ+МК+П+Щ+Ц$) приготовления смеси.

Возникает масса нерешенных вопросов: оптимальные расходы H_2O , ЛСТ и МК для покрытия зерен цемента разного диаметра, соотноше-

ния их между собой, наличие химических реакций в каждой системе, количество и качество новообразований и др.

Таблица 2. Результаты расчета системы «Цемент – суспензия МК»

№ поз	Наименование показателей	Величины
59	Вода затворения зерен цемента, л	147
60	Фактическое В/Ц	0,31
61	В воде затворения содержится, шт: - молекул H ₂ O	123 · 10 ²⁶
62	- молекул ЛСТ	700 · 10 ¹⁹
63	- зерен МК	285 · 10 ¹⁶
64	Суммарная поверхность зерен цемента, м ²	197400
65	Количество зерен цемента в 1 м ³ бетона, шт	157 · 10 ¹⁴
66	На одно зерно цемента расходуется, шт: - молекул H ₂ O	783 · 10 ⁹
67	- молекул ЛСТ	446 · 10 ³
68	- зерен МК	182
69	Количество слоев на одном зерне цемента, шт: - молекул H ₂ O	37
70	- молекул ЛСТ	4
71	- зерен МК	2
72	Толщина слоев на одном зерне цемента, Å: - молекул H ₂ O	103
73	- молекул ЛСТ	35
74	- зерен МК	3640
75	Суммарная толщина слоев H ₂ O+ЛСТ+МК на каждом зерне цемента, мк	0,38
76	Расстояние между двумя, рядом расположенными, зернами цемента, мк	0,76

Зачем нужна нанотехнология бетона? 1.Целенаправленно, разумно конструировать, вести химико-технологическое проектирование состава бетона от атома и молекулы до изделия с заданными физико-техническими свойствами. Повысить точность преобразования минералов цемента и возникновения новообразований. Компьютеризировать эти процессы 2.Уйти от эмпирических и подойти к теоретическим основам решения материаловедческих проблем. Именно нанотехнология обнажает массу нерешенных и приводит к научным основам решения материаловедческих проблем, в том числе компьютерного бетоноведения. 3.Теоретически конструировать и на максимум использовать функциональные возможности и взаимодействия компонентов

бетона (добавок, минералов, воды и др.) друг с другом. Понять механизм их действия. 4. Количественно определить важнейшие новообразования бетона, изучить их свойства и добиваться их получения. 5. Научиться управлять свойствами бетонных смесей, процессами твердения бетона и создания тех условий твердения, при которых возникнут в нужном количестве нужные нам новообразования, а, следовательно, и бетоны с заданными свойствами. Повысить однородность внутри- и межпартионных свойств бетона. 6. В макротехнологии бетона каждый предыдущий технологический передел (приготовление, уплотнение и т.п.) должен обеспечивать максимально успешную работу последующего.

На данном этапе истоки компьютерного бетоноведения заключаются в том, что, после выбора качества (в зависимости от условий эксплуатации и др.) и количества (ЛСТ, МК и др.) исходного сырья по методу абсолютных объемов, ведут компьютерное научное моделирование на молекулярном уровне с целью уточнения физико-химической взаимосвязи (совместимости, синтеза) компонентов бетона друг с другом.

Выводы

Работа с бетоном на уровне нанотехнологии с одной стороны выявляет большое количество нерешенных вопросов, с другой – вызывает уверенность в правильности подхода к научному созданию бетона заданных качеств, в более высокой точности проектирования состава шихты для бетона, сравнительно с современными методами. После выбора исходных материалов (в перспективе их будет выбирать компьютер) для определенных условий эксплуатации, начинается компьютерное бетоноведение. Системный подход, выявляющий взаимосвязь компонентов друг с другом и позволяющий применить компьютер для этой цели, – это истоки компьютерного бетоноведения. Продолжение следует.

Литература

1. Компьютерное материаловедение и обеспечение качества. Одесса, Астропринт.: 2006
2. А.Н. Плугин, А.А. Плугин, О.С. Борзяк, О.А. Калинин, С.В. Мирошниченко, Д.А. Плугин. «Проектирование долговечности конструкций и сооружений из бетона на основе физико-химических моделей». Там же, Л1.
3. Кучеренко А.А. О механизме пластификации бетонных смесей. Вестник ОГАСА, вып. Одесса.: 2007, -с.
4. Фисенко В.А. Микрокремнезем как активная минеральная добавка. В кн. «Химические и минеральные добавки в бетон». Харьков.: Колорит, 2005.
5. Бабушкин и др. Термодинамика силикатов. Стройиздат, М.: 1972.