

ПРИМЕНЕНИЕ НЕКОТОРЫХ ГЕОМЕТРИЧЕСКИХ МЕТОДОВ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ СТРУКТУРООБРАЗОВАНИЯ ВЯЖУЩИХ ВЕЩЕСТВ

Довгань И.В., Колесников А.В., Семенова С.В.

Одесская Государственная Академия Строительства и Архитектуры
г.Одесса

Вяжущие материалы с точки зрения структурно-функциональной теории систем можно представить как иерархические системы. На каждом этапе твердения вяжущих материалов для анализа механизмов структурообразования можно использовать некоторые геометрические методы. Исследуя вяжущие таким способом можно в дальнейшем направленно регулировать процессы формирования структуры для получения изделий с требуемыми свойствами.

Важной задачей в современном материаловедении является изучение процессов формирования структуры твердеющих вяжущих материалов. Перспективным, на наш взгляд, является применение некоторых геометрических методов для анализа механизмов структурообразования вяжущих веществ.

Для углубленного исследования структурообразования вяжущих веществ необходимо, на наш взгляд, использовать некоторые понятия структурно-функциональной теории систем. Структурно-функциональная теория систем [1,2] позволяет рассматривать произвольную систему как троичную. Элемент триады S представляет наиболее устойчивые, мало изменяющиеся свойства объектов. Наряду с ними у них присутствуют свойства, которые могут легко изменяться, наличествовать или отсутствовать и не влиять существенно на природу исходного объекта. Они в своей совокупности рассматриваются как функциональные F . Внешнее проявление этого объекта невозможно без процесса становления, его результат, называемый в диалектике "наличным бытием", возникает в процессе взаимодействия этих двух групп свойств. Он обеспечивает согласованность и единство системы как целого и представляет энерджентную подсистему E [1]. Структурно-функциональная теория включает набор правил, позволяющих логически корректно связывать эти триады друг с другом. Классическим примером может быть

результат становления структурной составляющей новой триады. С этой точки зрения, вяжущие вещества можно представить как иерархическую систему. Этапы процессов твердения и изменения пространственного строения материала для такой системы в общем виде можно представить как диаграмму (Рис.1), состоящую из звеньев. Каждое звено представляет собой триаду.

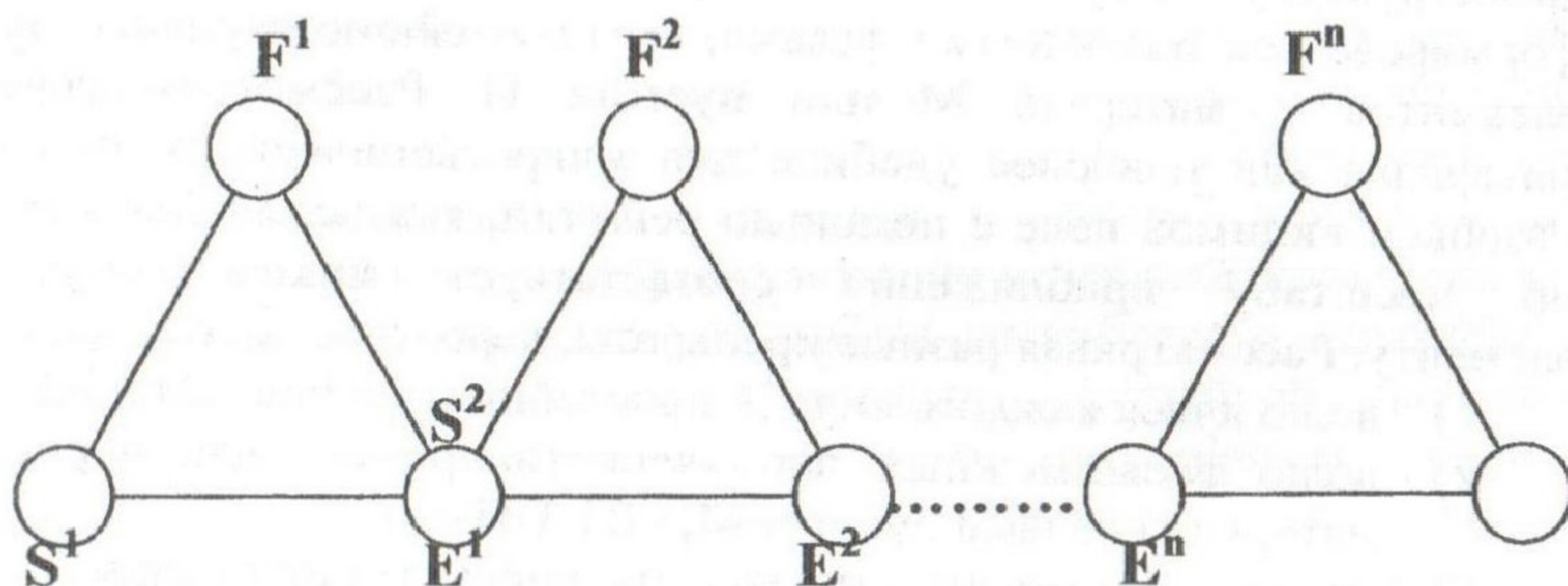


Рис.1. Символическая диаграмма вяжущего материала как иерархической системы

На начальном этапе рассматривается молекулярное строение и состав минеральных компонентов. Эти свойства определяют фактически все остальные, они мало изменяются со временем. С логической точки зрения они формируют структурную составляющую S^1 . При разных условиях кристаллизации F^1 (неоднородности концентрации, температуры, механические неоднородность) возникает поликристаллическая структура, образованная индивидуальными кристаллами, связанными друг с другом коагуляционными и фазовыми контактами. Это результат становления первой триады. От микроструктуры переходим к мезоскопической и далее к макроструктуре, тесно связанной с механическими свойствами. Этот переход всегда связан с затруднениями, локализующимися, как правило, на этапе мезоструктуры, которая характеризуется промежуточными пространственными масштабами. Здесь представляется возможным применить геометрический способ описания мезоструктуры. В отличие от многих физико-химических систем с затухающими мелкомасштабными флуктуациями, в твердеющих материалах играют существенную роль как длинноволновые, так и коротковолновые моды Фурье. Ближний порядок и локальность здесь даже более важны из-за физических

условий – малых коэффициентов диффузии и высокой вязкости. На этом этапе важными являются локальные черты строения материала, которые хорошо учитываются рассматриваемым способом.

Пусть микроструктурные элементы, формирующие мезоструктуру, могут быть некоторых видов $i = 1, n$. Они могут формироваться различными фазами, но простейшие варианты таких элементов – материал М или пустота П. Рассмотрим сечение материала как наиболее удобное для микроскопического изучения. Разобьем видимое поле с помощью решетки, каждая ячейка которой по масштабу приближенно соответствует микроструктурному элементу. Рассматривая разные препараты, вероятностно оцениваем:

- 1) долю ячеек каждого вида (в простейшем случае – М и П);
- 2) долю всевозможных пар ячеек (например, для пористого материала парами будут ММ, МП, ПП);
- 3) долю всевозможных троек, если решетка треугольная;
- 4) соседства вида МП-ММ, ПП-ММ и т.д.

Этот бесконечный список можно оборвать на п.2 в простейшем случае.

Далее следует вычислить геометрические характеристики. Например, параметр, характеризующий окаймленность (O_k) – величину границы структурных ансамблей. В простейшем виде этот параметр равен (1):

$$O_k = \frac{МП}{ММ + МП + ПП}, \quad (1)$$

где МП, ММ и ПП – число соответствующих пар в исследуемом поле.

Дополняющим его до единицы будет агрегированность (A_g), которая равна (2):

$$A_g = \frac{ММ + ПП}{ММ + МП + ПП}. \quad (2)$$

Вводя подобные геометрические характеристики мозаик материалов более строгим образом, а также варьируя характер решетки, получим опорные параметры, которые помогут определять механические свойства материалов. Их можно подставлять как факторы в эмпирические регрессионные уравнения макроскопических свойств. С другой стороны, они тесно связаны с микроструктурой и частично поддаются управляющему влиянию с помощью изменения физико-химических условий структурообразования. Одновременно они образуют необходимый интерпретационный мост между макроскопическими структурно-механическими характеристиками камневидного тела и молекулярными свойствами, как исходных

компонентов, так и образующихся минеральных веществ. Дальнейший шаг в этом направлении состоит в предположении, согласно которому носителями свойств материалов являются микроструктурные ансамбли – кластеры и агрегаты [3,4], строение которых можно выявить, например, рассматриваемым геометрическим исследованием, а также с помощью процедур распознавания образов. Эти мезоструктурные единицы объединяются, в свою очередь, в сетчатую структуру, что приводит к образованию хорошо известных макроскопических образцов. Такой подход позволяет решать задачи материаловедения, имеющие оптимизационный характер с одним или многими критериями оптимальности [5] на основании иерархического подхода – оптимизация мезоструктурных единиц ансамблевого характера и относительно независимая оптимизация случайной сетчатой структуры на их основе. Этим двум структурным уровням соответствуют различные периоды формирования в процессе схватывания материала, а также разные способы эффективного влияния на него.

Таким образом, исследуя механизмы формирования структуры с помощью различных геометрических методов на каждом этапе структурообразования можно в дальнейшем получить возможность направленно изменять основные свойства вяжущих материалов. Это позволит получать материалы и изделия на их основе с требуемыми физико-химическими характеристиками.

Литература

1. Дубров Я. А., Штелик В. Г., Маслова Н. В. «Системное моделирование и оптимизация в экономике», Киев, «Наукова думка», 1976, 252 с.
2. Кузнецова В. Л., Раков М.А. «Самоорганизация в технических системах», Киев, «Наукова думка», 1987, 200 с.
3. Выровой В.Н. Физико-механические особенности структурообразования композиционных строительных материалов. Автореферат дис.... доктора техн.наук.-Л.: 1988.-37с.
4. Соломатов В.И., Выровой В.Н., Дорофеев В.С., Сиренко А.В. Композиционные материалы пониженной материалоемкости. –Киев: Будивэльник, 1991. -144с.
5. Аоки М. Введение в методы оптимизации, М: , «Наука», 1977, 344 с.